

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2016/2017

Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej

Kierunek studiów: Studia Doktoranckie WliTCh

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: D

Stopień studiów: III

Specjalności: Technologia Chemiczna

1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	III Modelowanie molekularne
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	Molecular modelling
KOD PRZEDMIOTU	WITCh D oIIIS C8 16/17
KATEGORIA PRZEDMIOTU	Przedmioty kierunkowe
LICZBA PUNKTÓW ECTS	1.00
SEMESTRY	3

2 RODZAJ ZAJĘĆ, LICZBA GODZIN W PLANIE STUDIÓW

SEMESTR	WYKŁADY	ĆWICZENIA	LABORATORIUM	LABORATORIUM KOMPUTERO- WE	PROJEKT	SEMINARIUM
3	15	0	0	0	0	0

3 CELE PRZEDMIOTU

Cel 1 Zapoznanie doktorantów z możliwościami zastosowania nowoczesnych metod chemii teoretycznej w zakresie modelowania układów i procesów chemicznych na poziomie molekularnym

4 WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

1 Podstawy chemii

2 Chemia fizyczna

5 EFEKTY KSZTAŁCENIA

EK1 Wiedza Ogólna znajomość najważniejszych metod obliczeniowych chemii teoretycznej stosowanych w zagadnieniach modelowania molekularnego

EK2 Wiedza Znajomość metod teoretycznego prognozowania struktury, właściwości oraz reaktywności układów chemicznych

EK3 Wiedza Znajomość metod modelowania materiałów

EK4 Umiejętności Umiejętność stosowania właściwej terminologii dotyczącej metod chemii teoretycznej

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.	1
W2	Przegląd metod chemii teoretycznej: mechanika molekularna, metody ab initio, metody półempiryczne, teoria funkcjonału gęstości.	4
W3	Teoretyczne przewidywanie struktury, właściwości oraz reaktywności substancji	2
W4	Klasterowe i periodyczne modele ciał stałych oraz ich powierzchni. Metody hybrydowe (QM/MM, QM/QM).	2
W5	Przykłady zastosowania metod teoretycznych w modelowaniu układów i procesów chemicznych	6

7 NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

N1 Wykłady

N2 Prezentacje multimedialne

N3 Symulacje komputerowe

N4 Dyskusja

N5 Konsultacje

8 OBCIĄŻENIE PRACĄ STUDENTA

FORMA AKTYWNOŚCI	ŚREDNIA LICZBA GODZIN NA ZREALIZOWANIE AKTYWNOŚCI
Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim, w tym:	
Godziny wynikające z planu studiów	15
Konsultacje przedmiotowe	1
Egzaminy i zaliczenia w sesji	2
Godziny bez udziału nauczyciela akademickiego wynikające z nakładu pracy studenta, w tym:	
Przygotowanie się do zajęć, w tym studiowanie zalecanej literatury	22
Opracowanie wyników	0
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	20
SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA	60
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS DLA PRZEDMIOTU	1.00

9 SPOSOBY OCENY

OCENA PODSUMOWUJĄCA

P1 Egzamin ustny

KRYTERIA OCENY

EFEKT KSZTAŁCENIA 1	
NA OCENĘ 2.0	Doktorant nie zna metod chemii teoretycznej stosowanych w zagadnieniach modelowania molekularnego
NA OCENĘ 3.0	Doktorant potrafi wymienić tylko nazwy najważniejszych metod chemii teoretycznej
NA OCENĘ 3.5	Doktorant zna nazwy najważniejszych metod, orientuje się w możliwościach ich zastosowania
NA OCENĘ 4.0	Doktorant zna nazwy najważniejszych metod, w niewielkim stopniu rozumie ich podstawy teoretyczne, orientuje się w ich dokładności oraz możliwościach zastosowania
NA OCENĘ 4.5	Doktorant zna nazwy najważniejszych metod, dosyć dobrze rozumie ich podstawy teoretyczne, orientuje się w ich dokładności oraz możliwościach zastosowania

NA OCENĘ 5.0	Doktorant zna nazwy najważniejszych metod, bardzo dobrze rozumie ich podstawy teoretyczne, orientuje się w ich dokładności oraz możliwościach zastosowania
EFEKT KSZTAŁCENIA 2	
NA OCENĘ 2.0	Doktorant nie zna metod teoretycznego prognozowania struktury, właściwości oraz reaktywności układów chemicznych
NA OCENĘ 3.0	Doktorant potrafi tylko wymienić niektóre metody
NA OCENĘ 3.5	Doktorant potrafi wymienić niektóre metody oraz zna w niewielkim zakresie ich podstawowe cechy
NA OCENĘ 4.0	Doktorant potrafi wymienić metody, zna ich podstawowe cechy oraz ich najważniejsze wady i zalety
NA OCENĘ 4.5	Doktorant potrafi wymienić metody, zna ich podstawowe cechy, wady i zalety oraz orientuje się w możliwościach zastosowania
NA OCENĘ 5.0	Doktorant potrafi wymienić metody, zna 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	Doktorant nie zna metod modelowania materiałów
NA OCENĘ 3.0	Doktorant potrafi tylko wymienić niektóre metody
NA OCENĘ 3.5	Doktorant potrafi wymienić niektóre metody oraz zna w niewielkim zakresie ich podstawowe cechy
NA OCENĘ 4.0	Doktorant potrafi wymienić metody, zna ich podstawowe cechy oraz ich najważniejsze wady i zalety
NA OCENĘ 4.5	Doktorant potrafi wymienić metody, zna ich podstawowe cechy, wady i zalety oraz orientuje się w możliwościach zastosowania
NA OCENĘ 5.0	Doktorant potrafi wymienić metody, zna ich podstawowe cechy, wady i zalety, orientuje się w możliwościach zastosowania oraz dobrze rozumie podstawy teoretyczne wszystkich tych zagadnień
EFEKT KSZTAŁCENIA 4	
NA OCENĘ 2.0	Doktorant nie zna terminologii dotyczącej metod chemii teoretycznej
NA OCENĘ 3.0	Doktorant w bardzo ograniczonym stopniu potrafi stosować właściwą terminologię, nie zna większości terminów
NA OCENĘ 3.5	Doktorant w dosyć ograniczonym stopniu potrafi stosować właściwą terminologię, popełniając wiele błędów
NA OCENĘ 4.0	Doktorant na ogół potrafi stosować właściwą terminologię, ale w pozostałych przypadkach popełnia błędy

NA OCENĘ 4.5	Doktorant prawie zawsze potrafi stosować właściwą terminologię, popełniając niewiele błędów
NA OCENĘ 5.0	Doktorant zawsze bezbłędnie stosuje właściwą terminologię

10 MACIERZ REALIZACJI PRZEDMIOTU

EFEKT KSZTAŁCENIA	ODNIESIENIE DANEGO EFEKTU DO SZCZEGÓŁOWYCH EFEKTÓW ZDEFINIOWANYCH DLA PROGRAMU	CELE PRZEDMIOTU	TREŚCI PROGRAMOWE	NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE	SPOSOBY OCENY
EK1	KT_W01 KT_W04 KT_W07	Cel 1	W1 W2 W5	N1 N2 N3 N4 N5	P1
EK2	KT_W01 KT_W04 KT_W07	Cel 1	W1 W2 W3 W5	N1 N2 N3 N4 N5	P1
EK3	KT_W01 KT_W04 KT_W07	Cel 1	W1 W2 W4 W5	N1 N2 N3 N4 N5	P1
EK4	KI_U09	Cel 1	W1 W2 W3 W4 W5	N1 N2 N3 N4 N5	P1

11 WYKAZ LITERATURY

LITERATURA PODSTAWOWA

- [1] | **F. Jensen** — *Introduction to Computational Chemistry*, , 2007, Wiley
- [2] | **C. J. Cramer** — *Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models*, , 2004, Wiley
- [3] | **D. C. Young** — *Computational Chemistry. A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems*, ,, 2012, Wiley

LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA

- [1] | **L. Piel** — *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

[4] **P. Comba** — *Modeling of Molecular Properties*, „, 2011, Wiley

[5] **R. A. van Santen, P. Sautet** — *Computational Methods in Catalysis and Materials Science*, „, 2009, Wiley

LITERATURA DODATKOWA

[1] Artykuły naukowe związane z modelowaniem molekularnym

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: jhandz@pk.edu.pl)

13 ZATWIERDZENIE KARTY PRZEDMIOTU DO REALIZACJI

(miejscowość, data)

(odpowiedzialny za przedmiot)

(dziekan)

PRZYJMUJĘ DO REALIZACJI (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

.....