

# POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

## KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2016/2017

Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej

Kierunek studiów: Technologia Chemiczna

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: T

Stopień studiów: I

Specjalności: Kataliza Przemysłowa

### 1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	ST-1_KTOiPR Podstawy modelowania molekularnego
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	Basics of molecular modeling
KOD PRZEDMIOTU	WITCh TCH oIS D44 16/17
KATEGORIA PRZEDMIOTU	Przedmioty specjalnościowe
LICZBA PUNKTÓW ECTS	3.00
SEMESTRY	6

### 2 RODZAJ ZAJĘĆ, LICZBA GODZIN W PLANIE STUDIÓW

SEMESTR	WYKŁADY	ĆWICZENIA	LABORATORIUM	LABORATORIUM KOMPUTERO- WE	PROJEKT	SEMINARIUM
6	15	0	0	30	0	0

### 3 CELE PRZEDMIOTU

**Cel 1** Zapoznanie studentów z możliwościami zastosowania metod obliczeniowych chemii teoretycznej w zakresie modelowania układów i procesów chemicznych na poziomie molekularnym

## 4 WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

1 Zaliczony przedmiot Podstawy chemii

2 Zaliczony przedmiot Chemia fizyczna

## 5 EFEKTY KSZTAŁCENIA

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

**EK2 Wiedza** Znajomość metod teoretycznego przewidywania struktury i właściwości układów chemicznych

**EK3 Umiejętności** Umiejętność przygotowania danych wejściowych i uruchomienia prostych obliczeń w zakresie modelowania molekularnego

**EK4 Umiejętności** Umiejętność interpretacji wyników obliczeń - prognozowanie struktury i właściwości układów chemicznych

## 6 TREŚCI PROGRAMOWE

WYKŁADY		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
<b>W1</b>	Ogólne wprowadzenie do zagadnień modelowania molekularnego. Obliczenia statyczne i dynamiczne. Oprogramowanie stosowane w obliczeniach.	2
<b>W2</b>	Metody obliczeniowe chemii teoretycznej: mechanika molekularna, metody ab initio, metody półempiryczne, teoria funkcjonału gęstości.	4
<b>W3</b>	Analiza populacyjna. Teoretyczne przewidywanie struktury i właściwości substancji, w tym reaktywności.	2
<b>W4</b>	Metody hybrydowe (QM/MM, QM/QM) i ich zastosowanie w modelowaniu dużych cząsteczek oraz materiałów. Modele klasterowe i periodyczne ciała stałego.	2
<b>W5</b>	Przykłady wykorzystania modelowania molekularnego w badaniach układów i procesów chemicznych, w tym procesów katalitycznych.	5

LABORATORIUM KOMPUTEROWE		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
<b>K1</b>	Modelowanie molekularne wybranych układów: przygotowanie plików wejściowych, uruchomienie obliczeń z zastosowaniem specjalistycznego oprogramowania, wizualizacja i interpretacja wyników obliczeń.	30

## 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
<b>Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim, w tym:</b>	
Godziny wynikające z planu studiów	45
Konsultacje przedmiotowe	1
Egzaminy i zaliczenia w sesji	1
<b>Godziny bez udziału nauczyciela akademickiego wynikające z nakładu pracy studenta, w tym:</b>	
Przygotowanie się do zajęć, w tym studiowanie zalecanej literatury	16
Opracowanie wyników	15
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	12
<b>SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA</b>	<b>90</b>
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS DLA PRZEDMIOTU	3.00

## 9 SPOSOBY OCENY

### OCENA PODSUMOWUJĄCA

P1 Zaliczenie pisemne

P2 Sprawozdanie z ćwiczenia laboratoryjnego

P3 Zaliczenie ustne

### KRYTERIA OCENY

EFEKT KSZTAŁCENIA 1	
NA OCENĘ 3.0	Student potrafi wymienić tylko nazwy najważniejszych metod obliczeniowych chemii teoretycznej stosowanych w modelowaniu molekularnym

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 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 3.0	Student potrafi tylko wymienić niektóre metody teoretycznego przewidywania struktury i właściwości układów chemicznych
NA OCENĘ 4.0	Student potrafi wymienić metody, zna ich podstawowe cechy oraz ich najważniejsze wady i zalety
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 3.0	Student nie potrafi samodzielnie wykonać żadnych czynności związanych z przygotowaniem danych i uruchomieniem obliczeń - wymaga dużej pomocy prowadzącego
NA OCENĘ 4.0	Student wykonuje samodzielnie część czynności związanych z przygotowaniem danych i uruchomieniem obliczeń - w pozostałych przypadkach wymaga pomocy prowadzącego
NA OCENĘ 5.0	Student wykonuje w pełni samodzielnie wszystkie czynności związane z przygotowaniem danych i uruchomieniem obliczeń
EFEKT KSZTAŁCENIA 4	
NA OCENĘ 3.0	Student nie potrafi samodzielnie interpretować wyników obliczeń - wymaga dużej pomocy prowadzącego
NA OCENĘ 4.0	Student samodzielnie interpretuje część wyników obliczeń - w pozostałych przypadkach wymaga pomocy prowadzącego
NA OCENĘ 5.0	Student w pełni samodzielnie interpretuje wszystkie wyniki obliczeń

## 10 MACIERZ REALIZACJI PRZEDMIOTU

EFEKT KSZTAŁCENIA	ODNIESIENIE DANEGO EFEKTU DO SZCZEGÓLOWYCH EFEKTÓW ZDEFINIOWANYCH DLA PROGRAMU	CELE PRZEDMIOTU	TREŚCI PROGRAMOWE	NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE	SPOSOBY OCENY
EK1	K_W07	Cel 1	W1 W2 W5 K1	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3
EK2	K_W07 K_W08	Cel 1	W1 W2 W3 W4 W5 K1	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3
EK3	K_U07	Cel 1	W1 W2 W3 W4 W5 K1	N1 N2 N3 N4 N5	P2 P3
EK4	K_U07 K_U08 K_U18	Cel 1	W1 W2 W3 W4 W5 K1	N1 N2 N3 N4 N5	P2 P3

## 11 WYKAZ LITERATURY

### LITERATURA PODSTAWOWA

- [1] | **F. Jensen** — *Introduction to Computational Chemistry*, , 2007, Wiley-VCH
- [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-VCH

### 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
- [4] | **P. Comba** — *Modeling of Molecular Properties*, , 2011, Wiley-VCH
- [5] | **R. A. van Santen, P. Sautet** — *Computational Methods in Catalysis and Material Science*, , 2009, Wiley-VCH

### 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: )

## 13 ZATWIERDZENIE KARTY PRZEDMIOTU DO REALIZACJI

---

(miejsowość, data)

(odpowiedzialny za przedmiot)

(dziekan)

PRZYJMUJĘ DO REALIZACJI (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

.....