

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2018/2019

Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej

Kierunek studiów: Biotechnologia

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: B

Stopień studiów: II

Specjalności: Biotechnologia Przemysłowa i w Ochronie Środowiska

1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	Modelowanie molekularne
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	Molecular modelling
KOD PRZEDMIOTU	WITCh B oIIS C5 18/19
KATEGORIA PRZEDMIOTU	Przedmioty kierunkowe
LICZBA PUNKTÓW ECTS	2.00
SEMESTRY	1

2 RODZAJ ZAJĘĆ, LICZBA GODZIN W PLANIE STUDIÓW

SEMESTR	WYKŁADY	ĆWICZENIA	LABORATORIUM	LABORATORIUM KOMPUTERO- WE	PROJEKT	SEMINARIUM
1	15	0	0	15	0	0

3 CELE PRZEDMIOTU

Cel 1 Zapoznanie studentów 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 chemii teoretycznej stosowanych w zagadnieniach modelowania molekularnego

EK2 Wiedza Znajomość metod teoretycznego prognozowania struktury, właściwości i reaktywności układów chemicznych, modelowania materiałów oraz biocząsteczek

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
W1	Ogólne wprowadzenie do zagadnień modelowania molekularnego. Obliczenia statyczne i dynamiczne. Oprogramowanie stosowane w obliczeniach.	3
W2	Przegląd metod chemii teoretycznej: mechanika molekularna, metody ab initio, metody półempiryczne, teoria funkcjonału gęstości.	6
W3	Teoretyczne przewidywanie struktury, właściwości oraz reaktywności substancji	2
W4	Metody hybrydowe (QM/MM, QM/QM) i ich zastosowanie w modelowaniu dużych układów, biocząsteczek oraz materiałów.	2
W5	Przykłady zastosowania metod teoretycznych w modelowaniu i badaniu układów i procesów chemicznych.	2

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 Zaliczenie pisemne

P2 Sprawozdanie z ćwiczenia laboratoryjnego

P3 Zaliczenie ustne

KRYTERIA OCENY

EFEKT KSZTAŁCENIA 1	
NA OCENĘ 3.0	Student potrafi wymienić nazwy najważniejszych metod 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 wymienić niektóre metody teoretycznego prognozowania struktury, właściwości i reaktywności układów chemicznych, modelowania materiałów oraz biocząsteczek
NA OCENĘ 4.0	Student potrafi wymienić metody, zna ich podstawowe cechy oraz ich najważniejsze wady i zalety
NA OCENĘ 5.0	Student 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 3.0	Student nie potrafi samodzielnie wykonać czynności związanych z przygotowaniem danych i uruchamianiem obliczeń w zakresie modelowania molekularnego - wymaga dużej pomocy prowadzącego
NA OCENĘ 4.0	Student wykonuje samodzielnie część czynności związanych z przygotowaniem danych i uruchamianiem obliczeń - w pozostałych przypadkach wymaga pomocy prowadzącego
NA OCENĘ 5.0	Student wykonuje w pełni samodzielnie wszystkie czynności związane z przygotowaniem danych i uruchamianiem 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 SZCZEGÓŁO- WYCH EFEKTÓW ZDEFINIOWA- NYCH DLA PROGRAMU	CELE PRZEDMIOTU	TREŚCI PROGRAMOWE	NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE	SPOSOBY OCENY
EK1	K2_W01	Cel 1	W1 W2 W3 K1	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3
EK2	K2_W01 K2_W07 b	Cel 1	W1 W2 W3 W4 W5 K1	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3
EK3	K2_U01 b K2_U07 b	Cel 1	W1 W2 W3 W4 W5 K1	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3
EK4	K2_U01 b K2_U07 b	Cel 1	W1 W2 W3 W4 W5 K1	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3

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
- [4] | **P. Bladon, J. Gorton, R. B. Hammond** — *Molecular Modelling: Computational Chemistry Demystified*, , 2011, Royal Society of Chemistry
- [5] | **H.-D. Holtje** — *Molecular Modeling: Basic Principles and Applications*, , 2008, Wiley-VCH
- [6] | **G. Schneider, K.-H. Baringhaus** — *Molecular Design: Concepts and Applications*, , 2008, Wiley-VCH

LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA

- [1] | **L. Piela** — *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

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:)

2 dr inż. Paweł Śliwa (kontakt:)

13 ZATWIERDZENIE KARTY PRZEDMIOTU DO REALIZACJI

(miejscowość, data)

(odpowiedzialny za przedmiot)

(dziekan)

PRZYJMUJĘ DO REALIZACJI (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

.....

.....