

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2018/2019

Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej

Kierunek studiów: Technologia Chemiczna

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: T

Stopień studiów: II

Specjalności: Innovative Chemical Technologies

1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	Molecular modeling in catalysis and chemical technology
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	Molecular modeling in catalysis and chemical technology
KOD PRZEDMIOTU	WITCh TCH oIIS C5 18/19
KATEGORIA PRZEDMIOTU	Przedmioty kierunkowe
LICZBA PUNKTÓW ECTS	3.00
SEMESTRY	2

2 RODZAJ ZAJĘĆ, LICZBA GODZIN W PLANIE STUDIÓW

SEMESTR	WYKŁADY	ĆWICZENIA	LABORATORIUM	LABORATORIUM KOMPUTERO- WE	PROJEKT	SEMINARIUM
2	15	0	0	30	0	0

3 CELE PRZEDMIOTU

Cel 1 The lecture reviews the molecular modeling methods on a background of catalysis and chemical technology. Computational methods of theoretical chemistry will be discussed: molecular mechanics, ab initio and semi-empirical methods, density functional theory, hybrid methods (QM / MM, QM / QM) and their application in modeling of large molecules and materials. Special attention will be provided on the theoretical prediction of the structure and properties substances, including reactivity. The analysis of electronic structure of materials

(population and bond order analysis, Fukui indexes, density-of-state) will be presented. Examples of the use of molecular modeling in the research of systems and chemical processes, including catalytic processes, will be given. The laboratories consist of exercises on molecular modeling of selected systems: preparation of input files, running calculations using specialized software, visualization and interpretation of the results of calculations.

4 WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

5 EFEKTY KSZTAŁCENIA

EK1 Wiedza Student knows the most important methods in molecular modeling

EK2 Wiedza Student knows the methods of building crystal structure of materials used in catalysis and chemical technology; is familiar with possible geometrical models used in molecular modeling

EK3 Umiejętności Student is able to prepare input data and run simple calculations in the field molecular modeling as well as to interpret the results of computations; can predict the structure and properties of chemical systems

EK4 Kompetencje społeczne Student is able to work independently and in the group both at the laboratories and during preparation of the report; understand the advantages of molecular modeling in modern chemical technology research

6 TREŚCI PROGRAMOWE

LABORATORIUM KOMPUTEROWE		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
K1	Exercises on molecular modeling of selected systems: preparation of input files, running calculations using specialized software, visualization and interpretation of the results of calculations	30

WYKŁADY		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
W1	General introduction to molecular modeling. Static and dynamic calculations. Software used in calculations.	2
W2	Computational methods: molecular mechanics, ab initio methods, semi-empirical methods, density function theory	5
W3	Analysis of electronic structure: population and bond order analysis, Fukui indexes, density-of-state	3
W4	Hybrid methods: Hybrid methods (QM / MM, QM / QM) and their application in modeling of large molecules and materials	2

WYKŁADY		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
W5	Practical examples: Examples of the use of molecular modeling in the research of systems and chemical processes, including catalytic processes	3

7 NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

N1 lecture

N2 computer laboratory

8 OBCIĄŻENIE PRACĄ STUDENTA

FORMA AKTYWNOŚCI	ŚREDNIA LICZBA GODZIN NA ZREALIZOWANIE AKTYWNOŚCI
Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim, w tym:	
Godziny wynikające z planu studiów	45
Konsultacje przedmiotowe	10
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	8
Opracowanie wyników	10
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	10
SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA	85
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS DLA PRZEDMIOTU	3.00

9 SPOSOBY OCENY

OCENA FORMUJĄCA

F1 reports

OCENA PODSUMOWUJĄCA

P1 quiz

WARUNKI ZALICZENIA PRZEDMIOTU
W1 passing quiz and reports

KRYTERIA OCENY

EFEKT KSZTAŁCENIA 1	
NA OCENĘ 3.0	Test and reports result min 60% correct answers. Student have basic knowledge about the molecular modeling.
EFEKT KSZTAŁCENIA 2	
NA OCENĘ 3.0	Test and reports result min 60% correct answers. Student have basic knowledge about the molecular modeling.
EFEKT KSZTAŁCENIA 3	
NA OCENĘ 3.0	Test and reports result min 60% correct answers. Student have basic knowledge about the molecular modeling.
EFEKT KSZTAŁCENIA 4	
NA OCENĘ 3.0	Test and reports result min 60% correct answers. Student have basic knowledge about the molecular modeling.

10 MACIERZ REALIZACJI PRZEDMIOTU

EFEKT KSZTAŁCENIA	ODNIESIENIE DANEGO EFEKTU DO SZCZEGÓŁOWYCH EFEKTÓW ZDEFINIOWANYCH DLA PROGRAMU	CELE PRZEDMIOTU	TREŚCI PROGRAMOWE	NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE	SPOSOBY OCENY
EK1	K2_W02 K2_W07 K2_U05 K2_U08 b K2_K02	Cel 1	K1 W1 W2 W3 W4 W5	N1 N2	F1 P1
EK2	K2_W02 K2_W03 K2_W07 K2_W08 b K2_U05 K2_U20 b K2_K01	Cel 1	K1 W1 W2 W3 W4 W5	N1 N2	F1 P1

EFEKT KSZTAŁCENIA	ODNIESIENIE DANEGO EFEKTU DO SZCZEGÓŁOWYCH EFEKTÓW ZDEFINIOWANYCH DLA PROGRAMU	CELE PRZEDMIOTU	TREŚCI PROGRAMOWE	NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE	SPOSOBY OCENY
EK3	K2_W02 K2_W03 K2_W07 K2_W08 b K2_U05 K2_U20 b K2_K01 K2_K02	Cel 1	K1 W1 W2 W3 W4 W5	N1 N2	F1 P1
EK4	K2_W02 K2_W03 K2_W07 K2_W08 b K2_U20 b K2_K01	Cel 1	K1 W1 W2 W3 W4 W5	N1 N2	F1

11 WYKAZ LITERATURY

LITERATURA PODSTAWOWA

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

12 INFORMACJE O NAUCZYCIELACH AKADEMICKICH

OSOBA ODPOWIEDZIALNA ZA KARTĘ

dr hab. inż. prof. PK Izabela Czekaj (kontakt: izabela.czekaj@pk.edu.pl)

OSOBY PROWADZĄCE PRZEDMIOT

1 dr hab. inż., prof. PK Izabela Czekaj (kontakt: iczekaj@chemia.pk.edu.pl)

13 ZATWIERDZENIE KARTY PRZEDMIOTU DO REALIZACJI

(miejscowość, data) (odpowiedzialny za przedmiot) (dziekan)

PRZYJMUJĘ DO REALIZACJI (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

.....