

# 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: Chemia i Technologia Kosmetyków (4sem)

### 1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

|                                         |                                                 |
|-----------------------------------------|-------------------------------------------------|
| NAZWA PRZEDMIOTU                        | Modelowanie molekularne procesów katalitycznych |
| NAZWA PRZEDMIOTU<br>W JĘZYKU ANGIELSKIM | Molecular modelling of catalytic processes      |
| KOD PRZEDMIOTU                          | WITCh TCH oIIS C15 18/19                        |
| KATEGORIA PRZEDMIOTU                    | Przedmioty kierunkowe                           |
| LICZBA PUNKTÓW ECTS                     | 1.00                                            |
| SEMESTRY                                | 3                                               |

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

| SEMESTR | WYKŁADY | ĆWICZENIA | LABORATORIUM | LABORATORIUM<br>KOMPUTERO-<br>WE | PROJEKT | SEMINARIUM |
|---------|---------|-----------|--------------|----------------------------------|---------|------------|
| 3       | 0       | 0         | 0            | 0                                | 0       | 15         |

### 3 CELE PRZEDMIOTU

**Cel 1** Zapoznanie studentów z możliwościami zastosowania nowoczesnych metod chemii teoretycznej w zakresie modelowania układów i procesów katalitycznych

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

- 1 Podstawy chemii ogólnej
- 2 Znajomość podstawowych zagadnień z zakresu katalizy

## 5 EFEKTY KSZTAŁCENIA

**EK1 Wiedza** Ogólna znajomość najważniejszych metod chemii teoretycznej stosowanych w obliczeniach układów katalitycznych

**EK2 Wiedza** Znajomość metod modelowania powierzchni katalizatora

**EK3 Wiedza** Znajomość metod teoretycznego badania reaktywności układów chemicznych

**EK4 Umiejętności** Umiejętność zaprezentowania wybranego przykładu modelowania procesu katalitycznego opisanego w literaturze

**EK5 Umiejętności** Umiejętność stosowania właściwej terminologii dotyczącej metod chemii teoretycznej

## 6 TREŚCI PROGRAMOWE

| SEMINARIUM |                                                                                                                                     |                  |
|------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------|
| LP         | TEMATYKA ZAJĘĆ<br>OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH                                                                              | LICZBA<br>GODZIN |
| S1         | Ogólne wprowadzenie do zagadnień modelowania molekularnego. Oprogramowanie stosowane w obliczeniach.                                | 2                |
| S2         | Przegląd metod chemii teoretycznej: mechanika molekularna, metoda Hartree-Focka, metody półempiryczne, teoria funkcjonału gęstości. | 3                |
| S3         | Teoretyczne przewidywanie właściwości substancji oraz reaktywności.                                                                 | 1                |
| S4         | Klasterowe oraz periodyczne modele powierzchni katalizatorów. Metody hybrydowe (QM/MM) i ich zastosowanie w katalizie.              | 2                |
| S5         | Przykłady modelowania procesów katalitycznych.                                                                                      | 7                |

## 7 NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

- N1** Wykłady
- N2** Prezentacje multimedialne
- N3** Symulacje komputerowe reakcji katalitycznych
- N4** Dyskusja
- N5** Konsultacje

## 8 OBCIĄŻENIE PRACĄ STUDENTA

| FORMA AKTYWNOŚCI                                                                                 | ŚREDNIA LICZBA GODZIN<br>NA ZREALIZOWANIE<br>AKTYWNOŚCI |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------|
| <b>Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim, w tym:</b>                                     |                                                         |
| Godziny wynikające z planu studiów                                                               | 15                                                      |
| Konsultacje przedmiotowe                                                                         | 1                                                       |
| Egzaminy i zaliczenia w sesji                                                                    | 0                                                       |
| <b>Godziny bez udziału nauczyciela akademickiego wynikające z nakładu pracy studenta, w tym:</b> |                                                         |
| Przygotowanie się do zajęć, w tym studiowanie zalecanej literatury                               | 7                                                       |
| Opracowanie wyników                                                                              | 0                                                       |
| Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji                                           | 7                                                       |
| <b>SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z<br/>CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA</b>    | <b>30</b>                                               |
| SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS DLA PRZEDMIOTU                                                    | 1.00                                                    |

## 9 SPOSOBY OCENY

### OCENA PODSUMOWUJĄCA

**P1** Ocena prezentacji

**P2** Zaliczenie ustne

**P3** Zaliczenie pisemne

### KRYTERIA OCENY

| EFEKT KSZTAŁCENIA 1 |                                                                                                                                                               |
|---------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| NA OCENĘ 3.0        | Student zna nazwy najważniejszych metod chemii teoretycznej stosowanych w obliczeniach układów katalitycznych                                                 |
| 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, dobrze rozumie ich podstawy teoretyczne, orientuje się w ich dokładności oraz możliwościach zastosowań               |
| EFEKT KSZTAŁCENIA 2 |                                                                                                                                                               |
| NA OCENĘ 3.0        | Student zna nazwy metod modelowania powierzchni katalizatora                                                                                                  |

|                     |                                                                                                                                                                                                                                       |
|---------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| NA OCENĘ 4.0        | Student zna nazwy metod, 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 rozumie podstawy teoretyczne wszystkich tych zagadnień                                                                  |
| EFEKT KSZTAŁCENIA 3 |                                                                                                                                                                                                                                       |
| NA OCENĘ 3.0        | Student zna nazwy metod teoretycznego badania reaktywności układów chemicznych                                                                                                                                                        |
| NA OCENĘ 4.0        | Student zna nazwy metod, ich podstawowe cechy oraz możliwości zastosowania                                                                                                                                                            |
| NA OCENĘ 5.0        | Student zna nazwy metod, ich podstawowe cechy i możliwości zastosowania oraz rozumie ich podstawy teoretyczne                                                                                                                         |
| EFEKT KSZTAŁCENIA 4 |                                                                                                                                                                                                                                       |
| NA OCENĘ 3.0        | Student potrafi przygotować prezentację dotyczącą przykładu modelowania procesu katalitycznego, ale zawiera ona liczne błędy i jest przedstawiana nieudolnie, bez zrozumienia przekazywanych treści                                   |
| NA OCENĘ 4.0        | Student potrafi przygotować prezentację dotyczącą przykładu modelowania procesu katalitycznego, która zawiera nieliczne błędy i jest przedstawiana w sposób poprawny                                                                  |
| NA OCENĘ 5.0        | Student potrafi przygotować prezentację dotyczącą przykładu modelowania procesu katalitycznego, która nie zawiera żadnych uchybień i jest przedstawiana z zaangażowaniem, w sposób interesujący, dowodzący dobrego zrozumienia tematu |
| EFEKT KSZTAŁCENIA 5 |                                                                                                                                                                                                                                       |
| NA OCENĘ 3.0        | Student w stopniu bardzo ograniczonym potrafi stosować właściwą terminologię związaną z metodami chemii teoretycznej, nie zna większości terminów                                                                                     |
| NA OCENĘ 4.0        | Student na ogół potrafi stosować właściwą terminologię, ale w pozostałych przypadkach popełnia błędy                                                                                                                                  |
| NA OCENĘ 5.0        | Student zawsze 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               | K2_W01<br>K2_W06<br>K2_W07<br>K2_W09                                           | Cel 1           | S1 S2 S5          | N1 N2 N3 N4 N5        | P1 P2 P3      |
| EK2               | K2_W01<br>K2_W06<br>K2_W07<br>K2_W09                                           | Cel 1           | S1 S4 S5          | N1 N2 N3 N4 N5        | P1 P2 P3      |
| EK3               | K2_W01<br>K2_W06<br>K2_W07<br>K2_W09                                           | Cel 1           | S1 S3 S5          | N1 N2 N3 N4 N5        | P1 P2 P3      |
| EK4               | K2_U01<br>K2_U02<br>K2_U05                                                     | Cel 1           | S1 S2 S3 S4 S5    | N1 N2 N3 N4 N5        | P1 P2 P3      |
| EK5               | K2_U01<br>K2_U02<br>K2_U05                                                     | Cel 1           | S1 S2 S3 S4 S5    | 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

### 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

### LITERATURA DODATKOWA

- [1] | Artykuły naukowe dotyczące teoretycznych badań w zakresie katalizy

## 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

---

(miejscowość, data)

(odpowiedzialny za przedmiot)

(dziekan)

PRZYJMUJĘ DO REALIZACJI (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

.....