

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2019/2020

Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej

Kierunek studiów: Technologia Chemiczna

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: T

Stopień studiów: II

Specjalności: Kataliza Przemysłowa

1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	Modelowanie molekularne w katalizie
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	Molecular modeling in catalysis
KOD PRZEDMIOTU	WITCh TCH oIIS D9 19/20
KATEGORIA PRZEDMIOTU	Przedmioty specjalnościowe
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	15	0	15

3 CELE PRZEDMIOTU

Cel 1 Zapoznanie studentów z możliwościami zastosowania metod obliczeniowych chemii teoretycznej w zakresie modelowania oraz badania układów i procesów katalitycznych

4 WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

- 1 Wiedza w zakresie chemii ogólnej
- 2 Wiedza w zakresie chemii fizycznej
- 3 Zaliczony przedmiot Zjawiska powierzchniowe i kataliza przemysłowa

5 EFEKTY KSZTAŁCENIA

EK1 Wiedza Ogólna znajomość najważniejszych metod obliczeniowych chemii teoretycznej stosowanych w modelowaniu i badaniu układów katalitycznych

EK2 Wiedza Znajomość metod modelowania układów katalitycznych

EK3 Umiejętności Umiejętność modelowania układów katalitycznych oraz analizy wyników obliczeń kwantowochemicznych

EK4 Umiejętności Umiejętność zrozumienia i zaprezentowania wyników teoretycznych badań układów i procesów katalitycznych opublikowanych w międzynarodowych czasopismach naukowych

6 TREŚCI PROGRAMOWE

WYKŁADY		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
W1	Ogólne wprowadzenie do zagadnień modelowania układów katalitycznych oraz teoretycznego badania procesów katalitycznych.	2
W2	Przegląd metod chemii teoretycznej: mechanika molekularna, metody ab initio, metody półempiryczne, teoria funkcyjności gęstości.	4
W3	Teoretyczne przewidywanie aktywności oraz innych właściwości katalizatorów.	2
W4	Klasterowe oraz periodyczne modele katalizatorów heterogenicznych. Metody hybrydowe (QM/MM, QM/QM) i ich zastosowanie w katalizie heterogenicznej i homogenicznej.	3
W5	Przykłady modelowania katalizatorów oraz teoretycznych badań procesów katalitycznych.	4

LABORATORIUM KOMPUTEROWE		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
K1	Przygotowanie prostych modeli wybranych układów katalitycznych. Przygotowanie plików wejściowych, uruchomienie obliczeń z zastosowaniem specjalistycznego oprogramowania, wizualizacja i interpretacja uzyskanych wyników. Wizualizacja i interpretacja wyników obliczeń kwantowochemicznych układów katalitycznych na podstawie dostarczonych plików źródłowych.	15

SEMINARIUM		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
S1	Prezentacje referatów dotyczących teoretycznych badań układów i procesów katalitycznych, przygotowanych na podstawie wybranych artykułów naukowych w języku angielskim.	15

7 NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

N1 Wykłady

N2 Prezentacje multimedialne

N3 Dyskusja

N4 Ćwiczenia laboratoryjne

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	45
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	17
Opracowanie wyników	8
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	18
SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA	90
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS DLA PRZEDMIOTU	3.00

9 SPOSOBY OCENY

OCENA PODSUMOWUJĄCA

P1 Zaliczenie pisemne

P2 Sprawozdanie z ćwiczenia laboratoryjnego

P3 Zaliczenie ustne

P4 Ocena prezentacji

KRYTERIA OCENY

EFEKT KSZTAŁCENIA 1	
NA OCENĘ 3.0	Student potrafi wymienić tylko nazwy najważniejszych metod obliczeniowych chemii teoretycznej
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 tylko nazwy metod modelowania układów katalitycznych
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 dobrze rozumie podstawy teoretyczne wszystkich tych zagadnień
EFEKT KSZTAŁCENIA 3	
NA OCENĘ 3.0	Student z trudem buduje proste modele układów katalitycznych oraz analizuje wyniki obliczeń kwantowochemicznych - wymaga dużej pomocy prowadzącego
NA OCENĘ 4.0	Student potrafi budować proste modele układów katalitycznych oraz analizować wyniki obliczeń kwantowochemicznych z częściową pomocą prowadzącego
NA OCENĘ 5.0	Student potrafi samodzielnie budować proste modele układów katalitycznych oraz analizować ze zrozumieniem wyniki obliczeń kwantowochemicznych
EFEKT KSZTAŁCENIA 4	
NA OCENĘ 3.0	Student z trudem prezentuje wyniki badań teoretycznych przedstawionych w wybranym artykule naukowym, popełniając wiele błędów merytorycznych i językowych oraz nie potrafi poprawnie odpowiadać na zadawane pytania
NA OCENĘ 4.0	Student poprawnie prezentuje wyniki badań teoretycznych przedstawionych w wybranym artykule naukowym, popełniając nieliczne błędy merytoryczne i językowe oraz potrafi poprawnie odpowiadać na zadawane pytania
NA OCENĘ 5.0	Student bezbłędnie prezentuje wyniki badań teoretycznych przedstawionych w wybranym artykule naukowym oraz wyczerpująco odpowiada na zadawane pytania

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 K2_W06	Cel 1	W1 W2 W3 W5 K1 S1	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3 P4
EK2	K2_W05 K2_W09	Cel 1	W1 W4 W5 K1 S1	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3 P4
EK3	K2_U08 b	Cel 1	W1 W2 W3 W4 W5 K1 S1	N1 N2 N3 N4 N5	P2
EK4	K2_U01 K2_U02 K2_U05	Cel 1	W1 W2 W3 W4 W5 K1 S1	N1 N2 N3 N4 N5	P3 P4

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

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] **R. Rioux** — *Model Systems in Catalysis*, , 2010, Springer

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 prof. dr hab. inż. Jarosław Handzlik (kontakt:)

13 ZATWIERDZENIE KARTY PRZEDMIOTU DO REALIZACJI

(miejsowość, data)

(odpowiedzialny za przedmiot)

(dziekan)

PRZYJMUJĘ DO REALIZACJI (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

.....