

# 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: Analityka Przemysłowa i Środowiskowa, Chemia i Technologia Kosmetyków, Kataliza Przemysłowa, Lekka Technologia Organiczna, Technologia Polimerów, Technologie Środowiska i Gospodarka Odpadami

### 1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	Modelowanie molekularne procesów katalitycznych
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	Molecular modelling of catalytic processes
KOD PRZEDMIOTU	WITCh TCH oIIS C14 19/20
KATEGORIA PRZEDMIOTU	Przedmioty kierunkowe
LICZBA PUNKTÓW ECTS	1.00
SEMESTRY	2

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

SEMESTR	WYKŁADY	ĆWICZENIA	LABORATORIUM	LABORATORIUM KOMPUTERO- WE	PROJEKT	SEMINARIUM
2	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 OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA 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 NA ZREALIZOWANIE 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 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 K2_W06 K2_W07 K2_W09	Cel 1	S1 S2 S5	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3
EK2	K2_W01 K2_W06 K2_W07 K2_W09	Cel 1	S1 S4 S5	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3
EK3	K2_W01 K2_W06 K2_W07 K2_W09	Cel 1	S1 S3 S5	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3
EK4	K2_U01 K2_U02 K2_U05	Cel 1	S1 S2 S3 S4 S5	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3
EK5	K2_U01 K2_U02 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. 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

### 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)

.....