

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2020/2021

Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej

Kierunek studiów: Technologia Chemiczna

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: T

Stopień studiów: I

Specjalności: Kataliza Przemysłowa

1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	Podstawy modelowania molekularnego
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	Basics of molecular modeling
KOD PRZEDMIOTU	WITCh TCH oIS D6 20/21
KATEGORIA PRZEDMIOTU	Przedmioty specjalnościowe
LICZBA PUNKTÓW ECTS	3.00
SEMESTRY	6

2 RODZAJ ZAJĘĆ, LICZBA GODZIN W PLANIE STUDIÓW

SEMESTR	WYKŁADY	ĆWICZENIA	LABORATORIUM	LABORATORIUM KOMPUTERO- WE	PROJEKT	SEMINARIUM
6	15	0	0	30	0	0

3 CELE PRZEDMIOTU

Cel 1 Zapoznanie studentów z możliwościami zastosowania metod obliczeniowych chemii teoretycznej w zakresie modelowania układów i procesów chemicznych na poziomie molekularnym

4 WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

1 Zaliczony przedmiot Podstawy chemii

2 Zaliczony przedmiot Chemia fizyczna

5 EFEKTY KSZTAŁCENIA

EK1 Wiedza Ogólna znajomość najważniejszych metod obliczeniowych chemii teoretycznej stosowanych w modelowaniu molekularnym

EK2 Wiedza Znajomość metod teoretycznego przewidywania struktury i właściwości układów chemicznych

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.	2
W2	Metody obliczeniowe chemii teoretycznej: mechanika molekularna, metody ab initio, metody półempiryczne, teoria funkcjonału gęstości.	4
W3	Analiza populacyjna. Teoretyczne przewidywanie struktury i właściwości substancji, w tym reaktywności.	2
W4	Metody hybrydowe (QM/MM, QM/QM) i ich zastosowanie w modelowaniu dużych cząsteczek oraz materiałów. Modele klasterowe i periodyczne ciała stałego.	2
W5	Przykłady wykorzystania modelowania molekularnego w badaniach układów i procesów chemicznych, w tym procesów katalitycznych.	5

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 wyników obliczeń.	30

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	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	16
Opracowanie wyników	15
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	12
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

KRYTERIA OCENY

EFEKT KSZTAŁCENIA 1	
NA OCENĘ 3.0	Student potrafi wymienić tylko nazwy najważniejszych metod obliczeniowych 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 tylko wymienić niektóre metody teoretycznego przewidywania struktury i właściwości układów chemicznych
NA OCENĘ 4.0	Student potrafi wymienić metody, zna 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 nie potrafi samodzielnie wykonać żadnych czynności związanych z przygotowaniem danych i uruchomieniem obliczeń - wymaga dużej pomocy prowadzącego
NA OCENĘ 4.0	Student wykonuje samodzielnie część czynności związanych z przygotowaniem danych i uruchomieniem obliczeń - w pozostałych przypadkach wymaga pomocy prowadzącego
NA OCENĘ 5.0	Student wykonuje w pełni samodzielnie wszystkie czynności związane z przygotowaniem danych i uruchomieniem 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 SZCZEGÓŁOWYCH EFEKTÓW ZDEFINIOWANYCH DLA PROGRAMU	CELE PRZEDMIOTU	TREŚCI PROGRAMOWE	NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE	SPOSOBY OCENY
EK1	K1_W07	Cel 1	W1 W2 W5 K1	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3
EK2	K1_W07 K1_W08	Cel 1	W1 W2 W3 W4 W5 K1	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3
EK3	K1_U07 b	Cel 1	W1 W2 W3 W4 W5 K1	N1 N2 N3 N4 N5	P2 P3
EK4	K1_U07 b K1_U08 b K1_U18	Cel 1	W1 W2 W3 W4 W5 K1	N1 N2 N3 N4 N5	P2 P3

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

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] | **P. Comba** — *Modeling of Molecular Properties*, , 2011, Wiley-VCH
- [5] | **R. A. van Santen, P. Sautet** — *Computational Methods in Catalysis and Material Science*, , 2009, Wiley-VCH

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

2 mgr inż. Maciej Gierada (kontakt:)

13 ZATWIERDZENIE KARTY PRZEDMIOTU DO REALIZACJI

(miejscowość, data)

(odpowiedzialny za przedmiot)

(dziekan)

PRZYJMUJĘ DO REALIZACJI (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

.....

.....