

# POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

## KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2023/2024

Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki

Kierunek studiów: Fizyka Techniczna

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: FT.

Stopień studiów: I

Specjalności: Nowoczesne materiały i nanotechnologie, Modelowanie Komputerowe

### 1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

|                                         |                                     |
|-----------------------------------------|-------------------------------------|
| NAZWA PRZEDMIOTU                        | Projektowanie układów molekularnych |
| NAZWA PRZEDMIOTU<br>W JĘZYKU ANGIELSKIM | Design of molecular systems         |
| KOD PRZEDMIOTU                          | WIMiF FT. oIS B13 23/24             |
| KATEGORIA PRZEDMIOTU                    | Przedmioty podstawowe               |
| LICZBA PUNKTÓW ECTS                     | 3.00                                |
| SEMESTRY                                | 3                                   |

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

| SEMESTR | WYKŁAD | ĆWICZENIA | LABORATORIUM | LABORATORIUM<br>KOMPUTERO-<br>WE | SEMINARIUM | PROJEKT |
|---------|--------|-----------|--------------|----------------------------------|------------|---------|
| 3       | 15     | 0         | 0            | 30                               | 0          | 0       |

### 3 CELE PRZEDMIOTU

**Cel 1** Zapoznanie studentów z praktycznym wykorzystaniem metod fizyki i chemii w praktyce, a szczególności z ich wykorzystaniem do modelowania struktur molekularnych.

**Cel 2** Praktyczne zapoznanie studentów z profesjonalnym oprogramowaniem numerycznym do projektowania struktur molekularnych.

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

1 Znajomość podstawowych zagadnień z chemii.

## 5 EFEKTY KSZTAŁCENIA

**EK1 Wiedza** Student potrafi zbudować w programie HyperChem związek niskocząsteczkowy w 2D i 3D potrafi wyznaczyć długości i kąty wiązań, rozkład ładunku oraz współrzędne geometryczne.

**EK2 Wiedza** Student potrafi przeprowadzić optymalizację geometryczną wybranej molekuly metodami AM1 i PM3. Obliczyć momenty dipolowe i poziomy energetyczne HOMO i LUMO molekuł.

**EK3 Wiedza** Student potrafi zaprojektować trajektorię molekularno-dynamiczną w wybranej temperaturze.

**EK4 Wiedza** Modelowanie polipeptydów. Korzystanie z bazy danych. Porównanie struktur dwóch polipeptydów. Mutacje punktowe

## 6 TREŚCI PROGRAMOWE

| WYKŁAD |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                  |
|--------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------|
| LP     | TEMATYKA ZAJĘĆ<br>OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | LICZBA<br>GODZIN |
| W1     | Omówienie następujących zagadnień : Metody półempiryczne, ab initio oraz funkcjonałów gęstości elektronowej (DFT- density functional theory) podstawy teoretyczne ze szczególnym uwzględnieniem metod AM1 i PM3, Oddziaływanie konformacyjne, poziomy energetyczne HOMO i LUMO, Mechanika molekularna i kwantowa, Optymalizacja geometryczna, Dynamik molekularna, Widma absorpcji i fotoluminescencji. | 15               |

| LABORATORIUM KOMPUTEROWE |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |                  |
|--------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------|
| LP                       | TEMATYKA ZAJĘĆ<br>OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | LICZBA<br>GODZIN |
| K1                       | Zapoznanie z programem HyperChem. Konstrukcja wejściowych i wyjściowych pakietów obliczeniowych. Budowanie prostych cząsteczek w 2D i 3D. Pomiar właściwości strukturalnych cząsteczek; długości i kąty wiązań, rozkład ładunku, współrzędne geometryczne. Optymalizacja geometrii cząsteczek w wybranym polu siłowym. Wyznaczenie energii z wykorzystaniem metody półmitycznej. Analiza konformacyjna wybranych cząsteczek. Obliczanie momentów dipolowych w cząsteczkach oraz poziomów energetycznych HOMO i LUMO. Dynamika molekularna - projektowanie trajektorii molekularno-dynamicznej w dwóch wybranych temperaturach | 30               |

## 7 NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

N1 Wykłady

**N2** Ćwiczenia projektowe

**N3** Dyskusja

**N4** 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                                                               | 45                                                      |
| Konsultacje przedmiotowe                                                                         | 5                                                       |
| Egzaminy i zaliczenia w sesji                                                                    | 5                                                       |
| <b>Godziny bez udziału nauczyciela akademickiego wynikające z nakładu pracy studenta, w tym:</b> |                                                         |
| Przygotowanie się do zajęć, w tym studiowanie zalecanej literatury                               | 10                                                      |
| Opracowanie wyników                                                                              | 0                                                       |
| Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji                                           | 10                                                      |
| <b>SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z<br/>CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA</b>    | <b>75</b>                                               |
| SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS DLA PRZEDMIOTU                                                    | 3.00                                                    |

## 9 SPOSOBY OCENY

### OCENA FORMUJĄCA

**F1** Projekt indywidualny

**F2** Odpowiedź ustna

### OCENA PODSUMOWUJĄCA

**P1** Średnia ważona ocen formujących

### KRYTERIA OCENY

| EFEKT KSZTAŁCENIA 1 |                                                               |
|---------------------|---------------------------------------------------------------|
| NA OCENĘ 2.0        | Poniżej 55 % punktów możliwych do uzyskania                   |
| NA OCENĘ 3.0        | Wiedza, umiejętności na poziomie 51-60% przekazywanych treści |
| NA OCENĘ 3.5        | Wiedza, umiejętności na poziomie 61-70% przekazywanych treści |

|                     |                                                                |
|---------------------|----------------------------------------------------------------|
| NA OCENĘ 4.0        | Wiedza, umiejętności na poziomie 71-80% przekazywanych treści  |
| NA OCENĘ 4.5        | Wiedza, umiejętności na poziomie 81-90% przekazywanych treści  |
| NA OCENĘ 5.0        | Wiedza, umiejętności na poziomie 91-100% przekazywanych treści |
| EFEKT KSZTAŁCENIA 2 |                                                                |
| NA OCENĘ 2.0        | Poniżej 55 % punktów możliwych do uzyskania                    |
| NA OCENĘ 3.0        | Wiedza, umiejętności na poziomie 51-60% przekazywanych treści  |
| NA OCENĘ 3.5        | Wiedza, umiejętności na poziomie 61-70% przekazywanych treści  |
| NA OCENĘ 4.0        | Wiedza, umiejętności na poziomie 71-80% przekazywanych treści  |
| NA OCENĘ 4.5        | Wiedza, umiejętności na poziomie 81-90% przekazywanych treści  |
| NA OCENĘ 5.0        | Wiedza, umiejętności na poziomie 91-100% przekazywanych treści |
| EFEKT KSZTAŁCENIA 3 |                                                                |
| NA OCENĘ 2.0        | Poniżej 55 % punktów możliwych do uzyskania                    |
| NA OCENĘ 3.0        | Wiedza, umiejętności na poziomie 51-60% przekazywanych treści  |
| NA OCENĘ 3.5        | Wiedza, umiejętności na poziomie 61-70% przekazywanych treści  |
| NA OCENĘ 4.0        | Wiedza, umiejętności na poziomie 71-80% przekazywanych treści  |
| NA OCENĘ 4.5        | Wiedza, umiejętności na poziomie 81-90% przekazywanych treści  |
| NA OCENĘ 5.0        | Wiedza, umiejętności na poziomie 91-100% przekazywanych treści |
| EFEKT KSZTAŁCENIA 4 |                                                                |
| NA OCENĘ 2.0        | Poniżej 55 % punktów możliwych do uzyskania                    |
| NA OCENĘ 3.0        | Wiedza, umiejętności na poziomie 51-60% przekazywanych treści  |
| NA OCENĘ 3.5        | Wiedza, umiejętności na poziomie 61-70% przekazywanych treści  |
| NA OCENĘ 4.0        | Wiedza, umiejętności na poziomie 71-80% przekazywanych treści  |
| NA OCENĘ 4.5        | Wiedza, umiejętności na poziomie 81-90% przekazywanych treści  |
| NA OCENĘ 5.0        | Wiedza, umiejętności na poziomie 91-100% przekazywanych treści |

## 10 MACIERZ REALIZACJI PRZEDMIOTU

| EFEKT KSZTAŁCENIA | ODNIESIENIE DANEGO EFEKTU DO SZCZEGÓŁOWYCH EFEKTÓW ZDEFINIOWANYCH DLA PROGRAMU | CELE PRZEDMIOTU | TREŚCI PROGRAMOWE | NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE | SPOSOBY OCENY |
|-------------------|--------------------------------------------------------------------------------|-----------------|-------------------|-----------------------|---------------|
| EK1               |                                                                                | Cel 1           | W1 K1             | N1 N2 N3 N4           | F1 F2 P1      |
| EK2               |                                                                                | Cel 1 Cel 2     | W1 K1             | N1 N2 N3 N4           | F1 F2 P1      |
| EK3               |                                                                                | Cel 1 Cel 2     | W1 K1             | N1 N2 N3 N4           | F1 F2 P1      |
| EK4               |                                                                                | Cel 1 Cel 2     | W1 K1             | N1 N2 N3 N4           | F1 F2 P1      |

## 11 WYKAZ LITERATURY

### LITERATURA PODSTAWOWA

[1 ] Włodzimierz Kołos — *Chemia Kwantowa*, Warszawa, 1978, PWN

[2 ] Peter William Atkins — *Chemia Fizyczna*,, Warszawa, 2003, PWN

## 12 INFORMACJE O NAUCZYCIELACH AKADEMICKICH

### OSOBA ODPOWIEDZIALNA ZA KARTĘ

dr hab. Ewa Gondek (kontakt: egondek@pk.edu.pl)

### OSOBY PROWADZĄCE PRZEDMIOT

1 dr hab. Ewa Gondek, prof. PK (kontakt: egondek@pk.edu.pl)

2 dr Katarzyna Suchanek (kontakt: ksuchanek@pk.edu.pl)

## 13 ZATWIERDZENIE KARTY PRZEDMIOTU DO REALIZACJI

(miejscowość, data)

(odpowiedzialny za przedmiot)

(dziekan)

PRZYJMUJĘ DO REALIZACJI (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

.....  
 .....