

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2014/2015

Wydział Fizyki, Matematyki i Informatyki

Kierunek studiów: Nanotechnologie i nanomateriały

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: NN

Stopień studiów: II

Specjalności: Inżynieria nanostruktur II

1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	Komputerowe projektowanie struktur molekularnych
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	
KOD PRZEDMIOTU	WFMiI NN oIIS D1 14/15
KATEGORIA PRZEDMIOTU	Przedmioty specjalnościowe
LICZBA PUNKTÓW ECTS	3.00
SEMESTRY	1

2 RODZAJ ZAJĘĆ, LICZBA GODZIN W PLANIE STUDIÓW

SEMESTR	WYKŁAD	ĆWICZENIA	LABORATORIUM	LABORATORIUM KOMPUTERO- WE	SEMINARIUM	PROJEKT
1	0	0	0	30	15	0

3 CELE PRZEDMIOTU

Cel 1 Zapoznanie studentów z podstawami kwantowego opisu struktury przestrzennej molekuł, budowy ich powłok elektronowych i stanów oscylacyjnych.

Cel 2 Przypomnienie i utrwalenie wiedzy odnośnie metody orbitali molekularnych w zastosowaniu do opisu rodzajów wiązań cząsteczek i wyjaśnienia ich właściwości.

Cel 3 Przypomnienie i poszerzenie wiedzy w zakresie metod półempirycznych chemii kwantowej.

Cel 4 Zapoznanie z użytkowymi programami komputerowymi z zakresu chemii kwantowej do modelowania procesów molekularnych.

Cel 5 Nabycie przez studentów praktycznych umiejętności wykorzystywania komercyjnego oprogramowania z wykorzystaniem metody Hartree-Focka do obliczeń stanów energetycznych cząsteczek i optymalizacji ich struktury przestrzennej.

4 WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

1 Podstawy matematyki wyższej oraz podstaw fizyki ze szczególnym uwzględnieniem podstaw mechaniki kwantowej.

5 EFEKTY KSZTAŁCENIA

EK1 Wiedza Student zna równanie Hartree-Focka i metode LCAO, metody półempiryczne i metody ab initio. Potrafi przeprowadzić optymalizację geometryczną molekuly odpowiednią metodą.

EK2 Wiedza Student zna metodę CI (elektronowe stany wzbudzone)

EK3 Umiejętności Student potrafi policzyć za pomocą metod chemii kwantowej poziomy energetyczne molekuly, stany wibracyjne i rotacyjne, momenty dipolowe. Potrafi zaprojektować molekułę niskocząsteczkową o określonych właściwościach.

EK4 Umiejętności Zdobyć umiejętności stosowania w praktyce podstawowych technik obliczeniowych chemii kwantowej

6 TREŚCI PROGRAMOWE

LABORATORIUM KOMPUTEROWE		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
K1	Omówienie znaczenia technologii materiałowych dla współczesnej techniki. Klasyfikacja metod pomiarowych i projektowych w technologiach materiałowych. Rola chemii kwantowej w rozumieniu właściwości nowoczesnych materiałów dla Optoelektroniki i innych dziedzin techniki. Komercyjne programy komputerowe do projektowania struktur molekularnych i wyliczania ich podstawowych parametrów. Przedstawienie programów HyperChem i ISIS/Draw, omówienie ich możliwości w odniesieniu do projektowania prostych procesów molekularnych. prostych procesów molekularnych. Konstrukcja cząstek za pomocą programu HyperChem (3D) oraz ISIS/DRAW (2D).	4
K2	Omówienie podstawowych metod optymalizacji molekuł ze szczególnym uwzględnieniem metod AM1 i PM3. Zastosowanie programów HyperChem (3D) oraz ISIS/DRAW (2D) do projektowania prostych, kilkuatomowych cząsteczek i optymalizacja ich struktury przestrzennej. Wizualizacja graficzna otrzymanych wyników i ich interpretacja.	8
K3	Elektronowe i oscylacyjne widma absorpcji cząsteczek wieloatomowych. Prawdopodobieństwo przejścia elektronowego i dipolowy moment przejścia oraz zmiana struktury przestrzennej w stanie wzbudzonym. Symulacja trajektorii dynamiczno-molekularnej oraz jej interpretacja.	18

SEMINARIUM		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
S1	Metody pół-empirycznych -AM1, MINDO/3, PM3 na podstawie wybranych przykładów.	5
S2	Metody ab initio. np MP2 na podstawie wybranych przykładów	5
S3	Metody funkcjonału gęstości (DFT-density functional methods) NP. B3LYPn a podstawie wybranych przykładów	5

7 NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

N1 Ćwiczenia laboratoryjne

N2 Dyskusja

N3 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	15
Egzaminy i zaliczenia w sesji	5
Godziny bez udziału nauczyciela akademickiego wynikające z nakładu pracy studenta, w tym:	
Przygotowanie się do zajęć, w tym studiowanie zalecanej literatury	15
Opracowanie wyników	5
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	5
SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA	90
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS DLA PRZEDMIOTU	3.00

9 SPOSOBY OCENY

OCENA FORMUJĄCA

F1 Odpowiedź ustna

F2 Sprawozdanie z ćwiczenia laboratoryjnego

OCENA PODSUMOWUJĄCA
P1 Średnia ważona ocen formujących

KRYTERIA OCENY

EFEKT KSZTAŁCENIA 1	
NA OCENĘ 2.0	XXXXXXXXXXXXXXXXXX
NA OCENĘ 3.0	Na ocene dostateczna student zna metody optymalizacji struktury geometrycznej molekuł, potrafi zoptymalizować prostą molekulę niskocząsteczkową .
NA OCENĘ 3.5	student zna metody optymalizacji struktury geometrycznej molekuł, potrafi zoptymalizować prostą molekulę niskocząsteczkową za pomocą wybranej metody.
NA OCENĘ 4.0	student zna metody optymalizacji struktury geometrycznej molekuł, potrafi zoptymalizować prostą molekulę niskocząsteczkową za pomocą wybranej metody. Student potrafi zaprojektować molekulę o określonych właściwościach.
NA OCENĘ 4.5	student zna metody optymalizacji struktury geometrycznej molekuł, potrafi zoptymalizować prostą molekulę niskocząsteczkową za pomocą wybranej metody. Student potrafi zaprojektować molekulę o określonych właściwościach za pomocą wszystkich poznanych metod.
NA OCENĘ 5.0	student opanował wszystkie metody optymalizacji i potrafi zaprojektować dowolny związek niskocząsteczkowy o określonych właściwościach.
EFEKT KSZTAŁCENIA 2	
NA OCENĘ 2.0	XXXXXXXXXXXXXXXXXX
NA OCENĘ 3.0	Na ocene dostateczna student zna metody optymalizacji struktury geometrycznej molekuł, potrafi zaprojektować strukturę prostej cząsteczki .
NA OCENĘ 3.5	student zna metody optymalizacji struktury geometrycznej molekuł, potrafi zoptymalizować prostą molekulę niskocząsteczkową za pomocą wybranej metody.
NA OCENĘ 4.0	student zna metody optymalizacji struktury geometrycznej molekuł, potrafi zoptymalizować prostą molekulę niskocząsteczkową za pomocą wybranej metody. Student potrafi zaprojektować molekulę o określonych właściwościach.
NA OCENĘ 4.5	student zna metody optymalizacji struktury geometrycznej molekuł, potrafi zoptymalizować prostą molekulę niskocząsteczkową za pomocą wybranej metody. Student potrafi zaprojektować molekulę o określonych właściwościach za pomocą wszystkich poznanych metod.
NA OCENĘ 5.0	student opanował wszystkie metody optymalizacji i potrafi zaprojektować dowolny związek niskocząsteczkowy o określonych właściwościach.
EFEKT KSZTAŁCENIA 3	
NA OCENĘ 2.0	XXXXXXXXXXXXXXXXXX

NA OCENĘ 3.0	Na ocene dostateczna student zna metody optymalizacji struktury geometrycznej molekuł, potrafi zaprojektować strukturę prostej cząsteczki.
NA OCENĘ 3.5	student zna metody optymalizacji struktury geometrycznej molekuł, potrafi zoptymalizować prostą molekułę niskocząsteczkową za pomocą wybranej metody.
NA OCENĘ 4.0	student zna metody optymalizacji struktury geometrycznej molekuł, potrafi zoptymalizować prostą molekułę niskocząsteczkową za pomocą wybranej metody. Student potrafi zaprojektować molekułę o określonych właściwościach.
NA OCENĘ 4.5	student zna metody optymalizacji struktury geometrycznej molekuł, potrafi zoptymalizować prostą molekułę niskocząsteczkową za pomocą wybranej metody. Student potrafi zaprojektować molekułę o określonych właściwościach za pomocą wszystkich poznanych metod.
NA OCENĘ 5.0	student opanował wszystkie metody optymalizacji i potrafi zaprojektować dowolny związek niskocząsteczkowy o określonych właściwościach.
EFEKT KSZTAŁCENIA 4	
NA OCENĘ 2.0	XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
NA OCENĘ 3.0	Na ocene dostateczna student zna metody optymalizacji struktury geometrycznej molekuł, potrafi zaprojektować strukturę prostej cząsteczki.
NA OCENĘ 3.5	student zna metody optymalizacji struktury geometrycznej molekuł, potrafi zoptymalizować prostą molekułę niskocząsteczkową za pomocą wybranej metody.
NA OCENĘ 4.0	student zna metody optymalizacji struktury geometrycznej molekuł, potrafi zoptymalizować prostą molekułę niskocząsteczkową za pomocą wybranej metody. Student potrafi zaprojektować molekułę o określonych właściwościach.
NA OCENĘ 4.5	student zna metody optymalizacji struktury geometrycznej molekuł, potrafi zoptymalizować prostą molekułę niskocząsteczkową za pomocą wybranej metody. Student potrafi zaprojektować molekułę o określonych właściwościach za pomocą wszystkich poznanych metod.
NA OCENĘ 5.0	student opanował wszystkie metody optymalizacji i potrafi zaprojektować dowolny związek niskocząsteczkowy o określonych właściwościach.

10 MACIERZ REALIZACJI PRZEDMIOTU

EFEKT KSZTAŁCENIA	ODNIESIENIE DANEGO EFEKTU DO SZCZEGÓŁOWYCH EFEKTÓW ZDEFINIOWANYCH DLA PROGRAMU	CELE PRZEDMIOTU	TREŚCI PROGRAMOWE	NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE	SPOSOBY OCENY
EK1	K_W01, K_W06, K_U02, K_U12, K_U13, K_K03, K_K04	Cel 1 Cel 2 Cel 3 Cel 4 Cel 5	K1 K2 K3 S1 S2 S3	N1 N2 N3	F1 F2 P1
EK2	K_W01, K_W06, K_U12, K_U13, K_K03, K_K04	Cel 1 Cel 3 Cel 4 Cel 5	K1 K2 S1 S2 S3	N1 N2 N3	F1 F2 P1
EK3	K_W01, K_W03, K_W06, K_U12, K_U13, K_K03, K_K04	Cel 1 Cel 2 Cel 3 Cel 4 Cel 5	K1 K2 K3 S1 S2 S3	N1 N2 N3	F1 F2 P1
EK4	K_W01, K_W06, K_U06, K_U12, K_U13, K_K03, K_K04	Cel 1 Cel 2 Cel 3 Cel 4 Cel 5	K1 K2 K3 S1 S2 S3	N1 N2 N3	F1 F2 P1

11 WYKAZ LITERATURY

LITERATURA PODSTAWOWA

[1] Włodzimierz Kołos — *Chemia kwantowa*, Warszawa, 1975, PWN

[2] P.W. Atkins — *Molekularna mechanika kwantowa*, Warszawa, 1974, PWN

12 INFORMACJE O NAUCZYCIELACH AKADEMICKICH

OSOBA ODPOWIEDZIALNA ZA KARTĘ

dr Ewa Gondek (kontakt: e.gondek@wp.pl)

OSOBY PROWADZĄCE PRZEDMIOT

1 dr Ewa Gondek (kontakt:)

2 prof Jerzy Sanetra (kontakt:)



13 ZATWIERDZENIE KARTY PRZEDMIOTU DO REALIZACJI

(miejscowość, data)

(odpowiedzialny za przedmiot)

(dziekan)

PRZYJMUJĘ DO REALIZACJI (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

.....
.....