

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2018/2019

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 18/19
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

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

WYKŁADY		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
W1	Ogólne wprowadzenie do zagadnień modelowania układów katalitycznych oraz teoretycznego badania procesów katalitycznych.	2

WYKŁADY		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
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

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	K1 S1 W1 W2 W3 W5	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3 P4
EK2	K2_W05 K2_W09	Cel 1	K1 S1 W1 W4 W5	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3 P4
EK3	K2_U08 b	Cel 1	K1 S1 W1 W2 W3 W4 W5	N1 N2 N3 N4 N5	P2
EK4	K2_U01 K2_U02 K2_U05	Cel 1	K1 S1 W1 W2 W3 W4 W5	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. Piela** — *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 dr hab. inż. prof. PK Jarosław Handzlik (kontakt:)

13 ZATWIERDZENIE KARTY PRZEDMIOTU DO REALIZACJI

(miejsowość, data)

(odpowiedzialny za przedmiot)

(dziekan)

PRZYJMUJĘ DO REALIZACJI (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

.....