

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2020/2021

Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki

Kierunek studiów: Nanotechnologie i Nanomateriały

Profil: Praktyczny

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: NtiNm

Stopień studiów: I

Specjalności: Inżynieria nanostruktur

1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	Modelowanie molekularne nanostruktur
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	molecular modeling of nanostructures
KOD PRZEDMIOTU	WIMiF NTINM pIS D1 20/21
KATEGORIA PRZEDMIOTU	Przedmioty specjalnościowe
LICZBA PUNKTÓW ECTS	2.00
SEMESTRY	4

2 RODZAJ ZAJĘĆ, LICZBA GODZIN W PLANIE STUDIÓW

SEMESTR	WYKŁAD	ĆWICZENIA	LABORATORIUM	LABORATORIUM KOMPUTERO- WE	SEMINARIUM	PROJEKT
4	0	0	0	30	0	0

3 CELE PRZEDMIOTU

Cel 1 Zapoznanie studentów z praktycznym wykorzystaniem metod fizyki i chemii kwantowej w praktyce, a w 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 Podstawy optyki atomowej oraz mechaniki kwantowej

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 molekule metodami AM1 i PM3. Obliczyć momenty dipolowe i poziomy energetyczne HOMO i LUMO molekule.

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

LABORATORIUM KOMPUTEROWE		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA 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.	5
K2	Podstawy mechaniki molekularnej. Omówienie podstawowych metod optymalizacji ze szczególnym uwzględnieniem metod AM1 oraz PM3. Pola siłowe. Optymalizacja geometrii cząsteczek w wybranym polu siłowym. Wyznaczenie energii z wykorzystaniem metody półempirycznej. Analiza konformacyjna wybranych cząsteczek.	6
K3	Obliczanie momentów dipolowych w cząsteczkach oraz poziomów energetycznych HOMO i LUMO.	3
K4	Dynamika molekularna - projektowanie trajektorii molekularno-dynamicznej w dwóch wybranych temperaturach	6
K5	Modelowanie polipeptydów. Korzystanie z bazy danych. Porównanie struktur dwóch polipeptydów. Mutacje punktowe.	5
K6	Analiza wibracyjna stanów stacjonarnych. Wyznaczanie widm spektroskopii NMR. Obliczenia właściwości elektrostatycznych. Modelowanie reakcji chemicznych	5

7 NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

N1 Ćwiczenia projektowe

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	30
Konsultacje przedmiotowe	2
Egzaminy i zaliczenia w sesji	2
Godziny bez udziału nauczyciela akademickiego wynikające z nakładu pracy studenta, w tym:	
Przygotowanie się do zajęć, w tym studiowanie zalecanej literatury	5
Opracowanie wyników	0
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	5
SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA	44
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS DLA PRZEDMIOTU	2.00

9 SPOSOBY OCENY

OCENA FORMUJĄCA

F1 Projekt indywidualny

F2 Odpowiedź ustna

OCENA PODSUMOWUJĄCA

P1 Egzamin praktyczny

KRYTERIA OCENY

EFEKT KSZTAŁCENIA 1	
NA OCENĘ 3.0	opanowanie w 60% omawianego zagadnienia.
EFEKT KSZTAŁCENIA 2	
NA OCENĘ 3.0	opanowanie w 60% omawianego zagadnienia
EFEKT KSZTAŁCENIA 3	
NA OCENĘ 3.0	opanowanie w 60% omawianego zagadnienia

EFEKT KSZTAŁCENIA 4	
NA OCENĘ 3.0	opanowanie w 60% omawianego zagadnienia

10 MACIERZ REALIZACJI PRZEDMIOTU

EFEKT KSZTAŁCENIA	ODNIESIENIE DANEGO EFEKTU DO SZCZEGÓLOWYCH EFEKTÓW ZDEFINIOWANYCH DLA PROGRAMU	CELE PRZEDMIOTU	TREŚCI PROGRAMOWE	NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE	SPOSOBY OCENY
EK1	K1_W02 K1_W04 K1_W06	Cel 1 Cel 2	K1	N1 N2 N3	F1 F2 P1
EK2	K1_W01 K1_W02 K1_W04	Cel 1 Cel 2	K2	N1 N2 N3	F1 F2 P1
EK3	K1_W01 K1_W02 K1_W04 K1_W11	Cel 1 Cel 2	K4	N1 N2 N3	F1 F2 P1
EK4	K1_W01 K1_W02 K1_W04 K1_W05	Cel 1 Cel 2	K5	N1 N2 N3	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 (kontakt: egondek@pk.edu.pl)

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

13 ZATWIERDZENIE KARTY PRZEDMIOTU DO REALIZACJI

(miejsowość, data)

(odpowiedzialny za przedmiot)

(dziekan)

PRZYJMUJĘ DO REALIZACJI (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

.....

.....