

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2021/2022

Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki

Kierunek studiów: Fizyka Techniczna - New

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: FT new

Stopień studiów: I

Specjalności: Modelowanie Komputerowe - New, Nowoczesne materiały i nanotechnologie - New

1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	Projektowanie układów molekularnych
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	Design of molecular systems
KOD PRZEDMIOTU	WIMiF FT NEW oIS B13 21/22
KATEGORIA PRZEDMIOTU	Przedmioty podstawowe
LICZBA PUNKTÓW ECTS	3.00
SEMESTRY	3

2 RODZAJ ZAJĘĆ, LICZBA GODZIN W PLANIE STUDIÓW

SEMESTR	WYKŁAD	ĆWICZENIA	LABORATORIUM	LABORATORIUM KOMPUTERO- 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 OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA 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 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. 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 NA ZREALIZOWANIE AKTYWNOŚCI
Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim, w tym:	
Godziny wynikające z planu studiów	45
Konsultacje przedmiotowe	5
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	10
Opracowanie wyników	0
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	10
SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA	75
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 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 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 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 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	K_W02 K_W04 K_W06 K_W18	Cel 1	W1 K1	N1 N2 N3 N4	F1 F2 P1
EK2	K_W02 K_W04 K_W06 K_W18	Cel 1 Cel 2	W1 K1	N1 N2 N3 N4	F1 F2 P1
EK3	K_W02 K_W05 K_W06 K_W18	Cel 1 Cel 2	W1 K1	N1 N2 N3 N4	F1 F2 P1
EK4	K_W02 K_W04 K_W05 K_W06 K_W07 K_W09b K_W18	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)

.....
.....