

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2012/2013

Wydział Fizyki, Matematyki i Informatyki

Kierunek studiów: Fizyka techniczna

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: FT

Stopień studiów: I

Specjalności: Modelowanie komputerowe, Fizyka fazy skondensowanej, Nowoczesne materiały i nanotechnologie, Technologie multimedialne

1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	Projektowanie układów molekul.
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	
KOD PRZEDMIOTU	WFMiI FT oIS B11 12/13
KATEGORIA PRZEDMIOTU	Przedmioty podstawowe
LICZBA PUNKTÓW ECTS	4.00
SEMESTRY	3

2 RODZAJ ZAJĘĆ, LICZBA GODZIN W PLANIE STUDIÓW

SEMESTR	WYKŁAD	ĆWICZENIA	LABORATORIUM	LABORATORIUM KOMPUTERO- WE	SEMINARIUM	PROJEKT
3	15	15	0	15	0	0

3 CELE PRZEDMIOTU

Cel 1 Poznanie konfiguracji elektronowej atomów. Orbitale atomowe.

Cel 2 Rodzaje wiązań pomiędzy atomami.

Cel 3 Konfiguracja elektronowa cząsteczek, molekularne orbitale.

Cel 4 Wyznaczenie struktury związków chemicznych

Cel 5 Poziomy energetyczne HOMO i LUMO

4 WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

1 Podstawowa umiejętność posługiwania się systemem Windows

2 Znajomość podstawowych pojęć chemicznych.

5 EFEKTY KSZTAŁCENIA

EK1 Wiedza Struktura elektronowa atomów. Orbitale elektronowe.

EK2 Wiedza Orbitale molekularne

EK3 Wiedza Struktury chemiczne cząsteczek

EK4 Umiejętności Umiejętność wyliczenia poziomów HOMO i LUMO dla cząsteczek chemicznych.

6 TREŚCI PROGRAMOWE

LABORATORIUM KOMPUTEROWE		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
K1	Modelowanie molekularne za pomocą Programu HyperChem - omówienie możliwości wykorzystania pakietu programu HyperChem oraz ISIS/Draw do projektowania prostych procesów molekularnych.	2
K2	Konstrukcja cząstek za pomocą programu HyperChem (3D) oraz ISIS/DRAW (2D).	3
K3	Optymalizacja geometryczna zbudowanych molekuł- omówienie podstawowych metod optymalizacji ze szczególnym uwzględnieniem metod AM1 oraz PM3. Wizualizacja otrzymanych wyników oraz ich poprawna interpretacja.	5
K4	Obliczanie momentów dipolowych w cząsteczkach oraz poziomów energetycznych HOMO i LUMO.	2
K5	Dynamika molekularna - projektowanie trajektorii molekularno dynamicznej w dwóch wybranych temperaturach.	3

ĆWICZENIA		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
C1	Klasyfikacja związków, wzory sumaryczne ,strukturalne oraz nazewnictwo związków.	2

ĆWICZENIA		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
C2	Przykłady obliczeń stechiometrycznych, metody ustalania parametrów reakcji chemicznych.	2
C3	Obliczanie mas cząsteczkowych, ilości moli oraz objętości molowej związków chemicznych.	2
C4	Obliczeniae składu procentowego i wagowego związków na podstawie wzorów cząsteczkowych.	3
C5	obliczania dotyczące przygotowania roztworów o określonych stężeniach.	2
C6	Przykłady obliczeń dotyczących rozcieńczania, zagęszczania i mieszania roztworów.	2
C7	Reakcje utleniania-redukcji (redoks).	2

WYKŁAD		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
W1	Orbitale atomowe	1
W2	Połączenia atomowe	1
W3	Obsadzanie orbitali elektronowych przez elektrony. Konfiguracja elektronowa.	1
W4	Energia jonizacji, powinowactwo elektronowe, elektroujemność.	1
W5	Wiązania jonowe, kowalentne. Wiązania typu c i typu II	1
W6	Momenty dipolowe polarnych molekuł. Orbitale hybrydyzowane i ich kształt.	1
W7	Orbitale molekularne wiążące i antywiązące.	1
W8	Prawa rządzące konfigurację elektronową molekuł oraz stabilnością.	1
W9	Typy oddziaływania międzymolekularnego.	1
W10	Struktury krystaliczne, diagramy fazowe.	1
W11	Chemia organiczna.	1
W12	Polimery, klasyfikacje i właściwości	2
W13	Metody optymalizacji struktur molekularnych	2

7 NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

N1 Wykłady

N2 Zadania tablicowe

N3 Laboratorium komputerowe

8 OBCIĄŻENIE PRACĄ STUDENTA

FORMA AKTYWNOŚCI	ŚREDNIA LICZBA GODZIN NA ZREALIZOWANIE AKTYWNOŚCI
Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim, w tym:	
Godziny wynikające z planu studiów	0
Konsultacje przedmiotowe	10
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	30
Opracowanie wyników	15
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	15
SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA	75
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS DLA PRZEDMIOTU	4.00

9 SPOSOBY OCENY

OCENA FORMUJĄCA

F1 Kolokwium

F2 Sprawozdanie z ćwiczenia laboratoryjnego

OCENA PODSUMOWUJĄCA

P1 Egzamin pisemny

KRYTERIA OCENY

EFEKT KSZTAŁCENIA 1	
NA OCENĘ 2.0	Obecność na zajęciach z zajęć tablicowych. Obecność na laboratorium komputerowym

NA OCENĘ 3.0	60% całości obowiązującego materiału
NA OCENĘ 3.5	70% całości obowiązującego materiału
NA OCENĘ 4.0	80% całości obowiązującego materiału
NA OCENĘ 4.5	90% całości obowiązującego materiału
NA OCENĘ 5.0	100% całości obowiązującego materiału
EFEKT KSZTAŁCENIA 2	
NA OCENĘ 2.0	Obecność na zajęciach z zajęć tablicowych. Obecność na laboratorium komputerowym
NA OCENĘ 3.0	60% całości obowiązującego materiału
NA OCENĘ 3.5	70% całości obowiązującego materiału
NA OCENĘ 4.0	80% całości obowiązującego materiału
NA OCENĘ 4.5	90% całości obowiązującego materiału
NA OCENĘ 5.0	100% całości obowiązującego materiału
EFEKT KSZTAŁCENIA 3	
NA OCENĘ 2.0	Obecność na zajęciach z zajęć tablicowych. Obecność na laboratorium komputerowym
NA OCENĘ 3.0	60% całości obowiązującego materiału
NA OCENĘ 3.5	70% całości obowiązującego materiału
NA OCENĘ 4.0	80% całości obowiązującego materiału
NA OCENĘ 4.5	90% całości obowiązującego materiału
NA OCENĘ 5.0	100% całości obowiązującego materiału
EFEKT KSZTAŁCENIA 4	
NA OCENĘ 2.0	Obecność na zajęciach z zajęć tablicowych. Obecność na laboratorium komputerowym
NA OCENĘ 3.0	60% całości obowiązującego materiału
NA OCENĘ 3.5	70% całości obowiązującego materiału
NA OCENĘ 4.0	80% całości obowiązującego materiału
NA OCENĘ 4.5	90% całości obowiązującego materiału
NA OCENĘ 5.0	100% całości obowiązującego materiału

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_W05, K_W06, K_W15	Cel 1	K1 K2	N1	F1
EK2	K_W05, K_W06	Cel 2	K2 K3	N1 N2	F1 P1
EK3	K_W05, K_W06, K_W15, K_W18	Cel 3	K5 C6 C7 W8 W9	N1 N2	F2 P1
EK4	K_W06, K_U01	Cel 4	W9 W10 W11 W12 W13	N2 N3	F2 P1

11 WYKAZ LITERATURY

LITERATURA PODSTAWOWA

- [1] **Raymond Chang** — *Chemistry*, New York, 1991, Von Hoffmann Press Inc.
[2] **Hypercube, Inc.** — *HyperChem Release for Windows*, USA, 2002, Hypercube, Inc.

LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA

- [1] **Wojciech Łużny** — *Wstęp do właściwości polimerów*, Kraków, 2001, AGH

12 INFORMACJE O NAUCZYCIELACH AKADEMICKICH

OSOBA ODPOWIEDZIALNA ZA KARTĘ

prof. dr hab. Mieczysław Mucha (kontakt: mmucha@pk.edu.pl)

OSOBY PROWADZĄCE PRZEDMIOT

- 1 prof. dr hab. Jerzy A. Sanetra (kontakt: pusanetr@cyf-kr.edu.pl)
2 dr Ewa Gondek (kontakt:)



13 ZATWIERDZENIE KARTY PRZEDMIOTU DO REALIZACJI

(miejsowość, data)

(odpowiedzialny za przedmiot)

(dziekan)

PRZYJMUJĘ DO REALIZACJI (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

.....

.....