

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2012/2013

Wydział Fizyki, Matematyki i Informatyki

Kierunek studiów: Nanotechnologie i nanomateriały

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: NN

Stopień studiów: I

Specjalności: Inżynieria nanostruktur

1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	Modelowanie molekularne nanostruktur
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	
KOD PRZEDMIOTU	WFMiI NN oIS C3 12/13
KATEGORIA PRZEDMIOTU	Przedmioty kierunkowe
LICZBA PUNKTÓW ECTS	2.00
SEMESTRY	5

2 RODZAJ ZAJĘĆ, LICZBA GODZIN W PLANIE STUDIÓW

SEMESTR	WYKŁAD	ĆWICZENIA	LABORATORIUM	LABORATORIUM KOMPUTERO- WE	SEMINARIUM	PROJEKT
5	15	0	0	15	0	0

3 CELE PRZEDMIOTU

Cel 1 Zapoznanie studentów z możliwościami zastosowania nowoczesnych metod chemii teoretycznej w zakresie modelowania molekularnego, w tym modelowania materiałów, nanostruktur i katalizatorów

4 WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

1 Podstawy chemii ogólnej

2 Znajomość podstawowych zagadnień z zakresu katalizy

5 EFEKTY KSZTAŁCENIA

EK1 Wiedza Ogólna znajomość najważniejszych metod chemii teoretycznej stosowanych w modelowaniu molekularnym

EK2 Wiedza Znajomość metod modelowania materiałów

EK3 Umiejętności Umiejętność modelowania molekularnego prostych układów

EK4 Umiejętności Umiejętność wykonania prostych obliczeń metodami chemii kwantowej

6 TREŚCI PROGRAMOWE

WYKŁAD		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
W1	Ogólne wprowadzenie do zagadnień modelowania molekularnego. Obliczenia statyczne i dynamiczne. Oprogramowanie stosowane w obliczeniach.	2
W2	Przegląd metod chemii teoretycznej: mechanika molekularna, metody ab initio, metody półempiryczne, teoria funkcjonału gęstości.	4
W3	Teoretyczne przewidywanie właściwości substancji oraz reaktywności.	1
W4	Modele klasterowe oraz periodyczne. Metody hybrydowe (QM/MM, QM/QM) i ich zastosowanie w modelowaniu materiałów.	3
W5	Przykłady modelowania materiałów, nanostruktur i katalizatorów. Teoretyczne badania procesów katalitycznych.	5

LABORATORIUM KOMPUTEROWE		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
K1	Modelowanie molekularne wybranych układów: przygotowanie plików wejściowych, uruchomienie obliczeń z zastosowaniem specjalistycznego oprogramowania, wizualizacja i interpretacja uzyskanych wyników.	15

7 NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

N1 Wykłady

N2 Prezentacje multimedialne

N3 Dyskusja

N4 Konsultacje

N5 Ćwiczenia laboratoryjne

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	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	12
Opracowanie wyników	6
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	10
SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA	30
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS DLA PRZEDMIOTU	2.00

9 SPOSOBY OCENY

OCENA FORMUJĄCA

F1 Sprawozdanie z ćwiczenia laboratoryjnego

OCENA PODSUMOWUJĄCA

P1 Test

P2 Średnia ważona ocen formujących

KRYTERIA OCENY

EFEKT KSZTAŁCENIA 1	
NA OCENĘ 2.0	Student nie zna metod chemii teoretycznej stosowanych w modelowaniu molekularnym
NA OCENĘ 3.0	Student potrafi wymienić tylko nazwy najważniejszych metod chemii teoretycznej

NA OCENĘ 3.5	Student zna nazwy najważniejszych metod, orientuje się w ich możliwościach zastosowań
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 4.5	Student zna nazwy najważniejszych metod, dosyć dobrze 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 2.0	Student nie zna metod modelowania materiałów
NA OCENĘ 3.0	Student potrafi wymienić tylko nazwy metod
NA OCENĘ 3.5	Student zna nazwy metod oraz w niewielkim zakresie ich podstawowe cechy
NA OCENĘ 4.0	Student zna nazwy metod, ich podstawowe cechy oraz ich najważniejsze wady i zalety
NA OCENĘ 4.5	Student zna nazwy metod, ich podstawowe cechy, wady i zalety oraz orientuje się w możliwościach zastosowania
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 2.0	Student nie nabył w ogóle umiejętności modelowania molekularnego prostych układów
NA OCENĘ 3.0	Student nabył umiejętności modelowania molekularnego w stopniu dostatecznym
NA OCENĘ 3.5	Student nabył umiejętności modelowania molekularnego w stopniu dosyć dobrym
NA OCENĘ 4.0	Student nabył umiejętności modelowania molekularnego w stopniu dobrym
NA OCENĘ 4.5	Student nabył umiejętności modelowania molekularnego w stopniu ponad dobrym
NA OCENĘ 5.0	Student nabył umiejętności modelowania molekularnego w stopniu bardzo dobrym
EFEKT KSZTAŁCENIA 4	
NA OCENĘ 2.0	Student nie nabył w ogóle umiejętności wykonywania prostych obliczeń kwantowochemicznych
NA OCENĘ 3.0	Student nabył umiejętności wykonywania prostych obliczeń kwantowochemicznych w stopniu dostatecznym
NA OCENĘ 3.5	Student nabył umiejętności wykonywania prostych obliczeń kwantowochemicznych w stopniu dosyć dobrym

NA OCENĘ 4.0	Student nabył umiejętności wykonywania prostych obliczeń kwantowochemicznych w stopniu dobrym
NA OCENĘ 4.5	Student nabył umiejętności wykonywania prostych obliczeń kwantowochemicznych w stopniu ponad dobrym
NA OCENĘ 5.0	Student nabył umiejętności wykonywania prostych obliczeń kwantowochemicznych w stopniu bardzo dobrym

10 MACIERZ REALIZACJI PRZEDMIOTU

EFEKT KSZTAŁCENIA	ODNIESIENIE DANEGO EFEKTU DO SZCZEGÓŁOWYCH EFEKTÓW ZDEFINIOWANYCH DLA PROGRAMU	CELE PRZEDMIOTU	TREŚCI PROGRAMOWE	NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE	SPOSOBY OCENY
EK1	Array	Cel 1	W1 W2 W3 W5 K1	N1 N2 N3 N4 N5	F1 P1 P2
EK2	Array	Cel 1	W1 W4 W5 K1	N1 N2 N3 N4 N5	F1 P1 P2
EK3	Array	Cel 1	W1 W2 W3 W4 W5 K1	N1 N2 N3 N4 N5	F1 P1 P2
EK4	Array	Cel 1	W1 W2 W3 W4 W5 K1	N1 N2 N3 N4 N5	F1 P1 P2

11 WYKAZ LITERATURY

LITERATURA PODSTAWOWA

- [1] | **F. Jensen** — *Introduction to Computational Chemistry*, , 2007, Wiley
- [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

LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA

- [1] | **L. Pielą** — *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

LITERATURA DODATKOWA

[1] Artykuły naukowe związane z modelowaniem molekularnym materiałów

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)

.....