

# POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

## KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2013/2014

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<br>W JĘZYKU ANGIELSKIM |                                      |
| KOD PRZEDMIOTU                          | WFMiI NN oIS C3 13/14                |
| KATEGORIA PRZEDMIOTU                    | Przedmioty kierunkowe                |
| LICZBA PUNKTÓW ECTS                     | 2.00                                 |
| SEMESTRY                                | 5                                    |

### 2 RODZAJ ZAJĘĆ, LICZBA GODZIN W PLANIE STUDIÓW

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

| LABORATORIUM KOMPUTEROWE |                                                                                                                                                                                                       |                  |
|--------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------|
| LP                       | TEMATYKA ZAJĘĆ<br>OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH                                                                                                                                                | LICZBA<br>GODZIN |
| <b>K1</b>                | 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<br>NA ZREALIZOWANIE<br>AKTYWNOŚCI |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------|
| <b>Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim, w tym:</b>                                     |                                                         |
| Godziny wynikające z planu studiów                                                               | 0                                                       |
| Konsultacje przedmiotowe                                                                         | 1                                                       |
| Egzaminy i zaliczenia w sesji                                                                    | 1                                                       |
| <b>Godziny bez udziału nauczyciela akademickiego wynikające z nakładu pracy studenta, w tym:</b> |                                                         |
| Przygotowanie się do zajęć, w tym studiowanie zalecanej literatury                               | 12                                                      |
| Opracowanie wyników                                                                              | 6                                                       |
| Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji                                           | 10                                                      |
| <b>SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z<br/>CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA</b>    | <b>30</b>                                               |
| 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               | K_W01, K_W04, K_W06                                                            | Cel 1           | W1 W2 W3 W5 K1    | N1 N2 N3 N4 N5        | F1 P1 P2      |
| EK2               | K_W01, K_W04, K_W06                                                            | Cel 1           | W1 W4 W5 K1       | N1 N2 N3 N4 N5        | F1 P1 P2      |
| EK3               | K_U01, K_U07, K_U11                                                            | Cel 1           | W1 W2 W3 W4 W5 K1 | N1 N2 N3 N4 N5        | F1 P1 P2      |
| EK4               | K_U01, K_U07, K_U11                                                            | 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. Piel** — *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

---

(miejscowość, data)

(odpowiedzialny za przedmiot)

(dziekan)

PRZYJMUJĘ DO REALIZACJI (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

.....