

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2014/2015

Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej

Kierunek studiów: Technologia Chemiczna

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: T

Stopień studiów: II

Specjalności: Analityka Przemysłowa i Środowiskowa, Lekka Technologia Organiczna, Technologia Polimerów, Technologia Ropy i Gazu, Technologie Środowiska i Gospodarka Odpadami

1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	ST-2_12e Modelowanie molekularne procesów katalitycznych
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	Molecular modeling
KOD PRZEDMIOTU	WITCh TCH oIIS C1 14/15
KATEGORIA PRZEDMIOTU	Przedmioty kierunkowe
LICZBA PUNKTÓW ECTS	1.00
SEMESTRY	2

2 RODZAJ ZAJĘĆ, LICZBA GODZIN W PLANIE STUDIÓW

SEMESTR	WYKŁADY	ĆWICZENIA	LABORATORIUM	LABORATORIUM KOMPUTERO- WE	PROJEKT	SEMINARIUM
2	0	0	0	0	0	15

3 CELE PRZEDMIOTU

Cel 1 Zapoznanie studentów z możliwościami zastosowania nowoczesnych metod chemii teoretycznej w zakresie modelowania układów i procesów katalitycznych

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 obliczeniach układów katalitycznych

EK2 Wiedza Znajomość metod modelowania powierzchni katalizatora

EK3 Wiedza Znajomość metod teoretycznego badania reaktywności układów chemicznych

EK4 Umiejętności Umiejętność zaprezentowania wybranego przykładu modelowania procesu katalitycznego opisanego w literaturze

EK5 Umiejętności Umiejętność stosowania właściwej terminologii dotyczącej metod chemii teoretycznej

6 TREŚCI PROGRAMOWE

SEMINARIUM		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
S1	Ogólne wprowadzenie do zagadnień modelowania molekularnego. Oprogramowanie stosowane w obliczeniach.	2
S2	Przegląd metod chemii teoretycznej: mechanika molekularna, metoda Hartree-Focka, metody półempiryczne, teoria funkcjonału gęstości.	3
S3	Teoretyczne przewidywanie właściwości substancji oraz reaktywności.	1
S4	Klasterowe oraz periodyczne modele powierzchni katalizatorów. Metody hybrydowe (QM/MM) i ich zastosowanie w katalizie.	2
S5	Przykłady modelowania procesów katalitycznych.	7

7 NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

- N1** Wykłady
- N2** Prezentacje multimedialne
- N3** Symulacje komputerowe reakcji katalitycznych
- N4** Dyskusja
- N5** 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	0
Konsultacje przedmiotowe	1
Egzaminy i zaliczenia w sesji	0
Godziny bez udziału nauczyciela akademickiego wynikające z nakładu pracy studenta, w tym:	
Przygotowanie się do zajęć, w tym studiowanie zalecanej literatury	7
Opracowanie wyników	0
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	7
SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA	15
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS DLA PRZEDMIOTU	1.00

9 SPOSOBY OCENY

OCENA FORMUJĄCA

F1 Odpowiedź ustna

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 obliczeniach układów katalitycznych
NA OCENĘ 3.0	Student zna 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 powierzchni katalizatora
NA OCENĘ 3.0	Student zna tylko nazwy metod modelowania powierzchni katalizatora
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 zna metod teoretycznego badania reaktywności układów chemicznych
NA OCENĘ 3.0	Student zna tylko nazwy metod teoretycznego badania reaktywności układów chemicznych
NA OCENĘ 3.5	Student zna nazwy metod oraz tylko w niewielkim zakresie ich podstawowe cechy i możliwości zastosowania
NA OCENĘ 4.0	Student zna nazwy metod, ich podstawowe cechy oraz możliwości zastosowania
NA OCENĘ 4.5	Student zna nazwy metod, ich podstawowe cechy i możliwości zastosowania oraz dostatecznie rozumie ich podstawy teoretyczne
NA OCENĘ 5.0	Student zna nazwy metod, ich podstawowe cechy i możliwości zastosowania oraz dobrze rozumie ich podstawy teoretyczne
EFEKT KSZTAŁCENIA 4	
NA OCENĘ 2.0	Student nie potrafi przygotować i przedstawić prezentacji dotyczącej przykładu modelowania procesu katalitycznego
NA OCENĘ 3.0	Student potrafi przygotować prezentację dotyczącą przykładu modelowania procesu katalitycznego, ale zawiera ona liczne błędy i jest przedstawiana nieudolnie, bez zrozumienia przekazywanych treści
NA OCENĘ 3.5	Student potrafi przygotować prezentację dotyczącą przykładu modelowania procesu katalitycznego, ale zawiera ona błędy i jest przedstawiana w sposób mało zrozumiały

NA OCENĘ 4.0	Student potrafi przygotować prezentację dotyczącą przykładu modelowania procesu katalitycznego, która zawiera nieliczne błędy i jest przedstawiana w sposób poprawny
NA OCENĘ 4.5	Student potrafi przygotować prezentację dotyczącą przykładu modelowania procesu katalitycznego, która zawiera tylko drobne uchybienia i jest przedstawiana w sposób interesujący
NA OCENĘ 5.0	Student potrafi przygotować prezentację dotyczącą przykładu modelowania procesu katalitycznego, która nie zawiera żadnych uchybień i jest przedstawiana z zaangażowaniem, w sposób bardzo interesujący, dowodzący dobrego zrozumienia tematu
EFEKT KSZTAŁCENIA 5	
NA OCENĘ 2.0	Student w ogóle nie zna terminologii związanej z metodami chemii teoretycznej
NA OCENĘ 3.0	Student w stopniu bardzo ograniczonym potrafi stosować właściwą terminologię, nie zna większości terminów
NA OCENĘ 3.5	Student w dosyć ograniczonym stopniu potrafi stosować właściwą terminologię, popełniając wiele błędów
NA OCENĘ 4.0	Student na ogół potrafi stosować właściwą terminologię, ale w pozostałych przypadkach popełnia błędy
NA OCENĘ 4.5	Student prawie zawsze potrafi stosować właściwą terminologię, popełniając niewiele błędów
NA OCENĘ 5.0	Student zawsze bezbłędnie stosuje właściwą terminologię

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_W06 K_W07 K_W09	Cel 1	S1 S2 S5	N1 N2 N3 N4 N5	F1 P1 P2
EK2	K_W01 K_W06 K_W07 K_W09	Cel 1	S1 S4 S5	N1 N2 N3 N4 N5	F1 P1 P2
EK3	K_W01 K_W06 K_W07 K_W09	Cel 1	S1 S3 S5	N1 N2 N3 N4 N5	F1 P1 P2

EFEKT KSZTAŁCENIA	ODNIESIENIE DANEGO EFEKTU DO SZCZEGÓŁOWYCH EFEKTÓW ZDEFINIOWANYCH DLA PROGRAMU	CELE PRZEDMIOTU	TREŚCI PROGRAMOWE	NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE	SPOSOBY OCENY
EK4	K_U01 K_U02 K_U05	Cel 1	S1 S2 S3 S4 S5	N1 N2 N3 N4 N5	F1 P1 P2
EK5	K_U01 K_U02 K_U05	Cel 1	S1 S2 S3 S4 S5	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 dotyczące teoretycznych badań w zakresie katalizy

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)

.....