

Karta przedmiotu

obowiązuje doktorantów Szkoły Doktorskiej PK rozpoczynających kształcenie
w roku akademickim 2022/2023

Informacje o przedmiocie

Nazwa przedmiotu w języku polskim	Modelowanie molekularne
Nazwa przedmiotu w języku angielskim	Molecular modelling
Liczba punktów ECTS	1
Język wykładowy	Polski
Kategoria przedmiotu	Obowiązkowy
Dziedzina kształcenia	Nauki inżynieryjno-techniczne
Dyscyplina kształcenia	Inżynieria chemiczna
Osoba odpowiedzialna za przedmiot Kontakt	Prof. dr hab. inż. Jarosław Handzlik jaroslaw.handzlik@pk.edu.pl

Rodzaj zajęć, liczba godzin w planie studiów

Semestr	Forma zaliczenia (O / Z)*	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Laboratorium komputerowe	Projekt	Seminarium
3	O	15	0	0	0	0	0

*O - zaliczenie na ocenę, Z – zaliczenie bez oceny

Cele przedmiotu

Kod	Opis celu
Cel1	Zapoznanie doktorantów z możliwościami zastosowania nowoczesnych metod chemii teoretycznej w zakresie modelowania układów i procesów chemicznych na poziomie molekularnym.
Cel2	Zapoznanie doktorantów z podstawami metod obliczeniowych chemii teoretycznej.

Efekty uczenia się

Kod	Opis efektu uczenia się z uwzględnieniem specyfiki dyscypliny	Symbol efektu uczenia się w SD PK	Sposoby weryfikacji
EFEKTY W ZAKRESIE WIEDZY			
EKW1	Doktorant zna najważniejsze metody obliczeniowe chemii teoretycznej stosowane w zagadnieniach modelowania molekularnego.	E_W01, E_W02	Zaliczenie ustne
EKW2	Doktorant zna metody teoretycznego prognozowania struktury, właściwości oraz reaktywności układów chemicznych.	E_W01, E_W02	Zaliczenie ustne
EKW3	Doktorant zna metody modelowania materiałów.	E_W01, E_W02	Zaliczenie ustne
EFEKTY W ZAKRESIE UMIEJĘTNOŚCI			

EKU1	Doktorant potrafi komunikować się na tematy związane z modelowaniem molekularnym, stosując właściwą terminologię.	E_U04	Zaliczenie ustne, dyskusja.
------	---	-------	-----------------------------

Treści programowe

Lp.	Treści	Efekty uczenia się dla przedmiotu	Liczba godzin
WYKŁAD			
W1	Ogólne wprowadzenie do zagadnień modelowania molekularnego. Obliczenia statyczne i dynamiczne. Oprogramowanie stosowane w obliczeniach.	EKW1, EKW2, EKW3, EKU1	3
W2	Metody obliczeniowe chemii teoretycznej: mechanika molekularna, metody ab initio, metody półempiryczne, metody oparte na teorii funkcjonału gęstości.	EKW1, EKW2, EKW3, EKU1	6
W3	Teoretyczne przewidywanie struktury, właściwości oraz reaktywności substancji.	EKW2, EKU1	2
W4	Modelowanie ciała stałego – modele klasterowe i periodyczne. Metody hybrydowe (QM/MM, QM/QM).	EKW3, EKU1	2
W5	Przykłady zastosowania metod obliczeniowych chemii teoretycznej w modelowaniu układów i procesów chemicznych.	EKW1, EKW2, EKW3, EKU1	2

Bilans punktów ECTS

ROZLICZENIE GODZIN	
Forma aktywności	Średnia liczba godzin (45 min) poświęconych na realizację rodzaju zajęć
GODZINY KONTAKTOWE Z NAUCZYCIELEM AKADEMICKIM	
Godziny wynikające z programu kształcenia	15
Konsultacje	1
Egzamin / zaliczenie	2
GODZINY BEZ UDZIAŁU NAUCZYCIELA AKADEMICKIEGO	
Samodzielne studiowanie tematyki zajęć	12
Przygotowanie referatu, raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	0
BILANS PUNKTÓW ECTS	
Łączna suma godzin	30
Liczba punktów ECTS	1

Wymagania wstępne

Lp.	Wymagania
1	Znajomość chemii ogólnej.
2	Znajomość chemii fizycznej.

Warunki zaliczenia / sposób obliczania oceny końcowej

Lp.	Opis
WARUNKI ZALICZENIA	
1	Uzyskanie pozytywnej oceny z zaliczenia ustnego.
SPOSÓB WYZNACZENIA OCENY KOŃCOWEJ	
Ocena z zaliczenia ustnego.	

Dodatkowe informacje

Brak

Literatura

1	Jensen F., <i>Introduction to Computational Chemistry</i> , 2017, Wiley.
2	Cramer C.J., <i>Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models</i> , 2013, Wiley.
3	Young D.C., <i>Computational Chemistry. A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems</i> , 2001, Wiley.
4	Piela L., <i>Idee chemii kwantowej</i> , 2021, PWN.
5	Artykuły naukowe związane z modelowaniem molekularnym.

Zatwierdzenie karty przedmiotu

Osoba odpowiedzialna za przedmiot	
Dyrektor Szkoły Doktorskiej Politechniki Krakowskiej	
Miejscowość, data	