

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2020/2021

Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej

Kierunek studiów: Biotechnologia

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: B

Stopień studiów: II

Specjalności: Biotechnologia Przemysłowa i w Ochronie Środowiska

1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	Modelowanie molekularne
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	Molecular modelling
KOD PRZEDMIOTU	WITCh B oIIS C5 20/21
KATEGORIA PRZEDMIOTU	Przedmioty kierunkowe
LICZBA PUNKTÓW ECTS	2.00
SEMESTRY	1

2 RODZAJ ZAJĘĆ, LICZBA GODZIN W PLANIE STUDIÓW

SEMESTR	WYKŁADY	ĆWICZENIA	LABORATORIUM	LABORATORIUM KOMPUTERO- WE	PROJEKT	SEMINARIUM
1	15	0	0	15	0	0

3 CELE PRZEDMIOTU

Cel 1 Zapoznanie studentów z możliwościami zastosowania nowoczesnych metod chemii teoretycznej w zakresie modelowania układów i procesów chemicznych na poziomie molekularnym

4 WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

1 Podstawy chemii

2 Chemia fizyczna

5 EFEKTY KSZTAŁCENIA

EK1 Wiedza Ogólna znajomość najważniejszych metod chemii teoretycznej stosowanych w zagadnieniach modelowania molekularnego

EK2 Wiedza Znajomość metod teoretycznego prognozowania struktury, właściwości i reaktywności układów chemicznych, modelowania materiałów oraz biocząsteczek

EK3 Umiejętności Umiejętność przygotowania danych wejściowych i uruchomienia prostych obliczeń w zakresie modelowania molekularnego

EK4 Umiejętności Umiejętność interpretacji wyników obliczeń - prognozowanie struktury i właściwości układów chemicznych

6 TREŚCI PROGRAMOWE

WYKŁADY		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
W1	Ogólne wprowadzenie do zagadnień modelowania molekularnego. Obliczenia statyczne i dynamiczne. Oprogramowanie stosowane w obliczeniach.	3
W2	Przegląd metod chemii teoretycznej: mechanika molekularna, metody ab initio, metody półempiryczne, teoria funkcjonału gęstości.	6
W3	Teoretyczne przewidywanie struktury, właściwości oraz reaktywności substancji	2
W4	Metody hybrydowe (QM/MM, QM/QM) i ich zastosowanie w modelowaniu dużych układów, biocząsteczek oraz materiałów.	2
W5	Przykłady zastosowania metod teoretycznych w modelowaniu i badaniu układów i procesów chemicznych.	2

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	30
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	60
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS DLA PRZEDMIOTU	2.00

9 SPOSOBY OCENY

OCENA PODSUMOWUJĄCA

P1 Zaliczenie pisemne

P2 Sprawozdanie z ćwiczenia laboratoryjnego

P3 Zaliczenie ustne

KRYTERIA OCENY

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

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 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 3.0	Student potrafi wymienić niektóre metody teoretycznego prognozowania struktury, właściwości i reaktywności układów chemicznych, modelowania materiałów oraz biocząsteczek
NA OCENĘ 4.0	Student potrafi wymienić metody, zna ich podstawowe cechy oraz ich najważniejsze wady i zalety
NA OCENĘ 5.0	Student potrafi wymienić metody, zna ich podstawowe cechy, wady i zalety, orientuje się w możliwościach zastosowania oraz dobrze rozumie podstawy teoretyczne wszystkich tych zagadnień
EFEKT KSZTAŁCENIA 3	
NA OCENĘ 3.0	Student nie potrafi samodzielnie wykonać czynności związanych z przygotowaniem danych i uruchamianiem obliczeń w zakresie modelowania molekularnego - wymaga dużej pomocy prowadzącego
NA OCENĘ 4.0	Student wykonuje samodzielnie część czynności związanych z przygotowaniem danych i uruchamianiem obliczeń - w pozostałych przypadkach wymaga pomocy prowadzącego
NA OCENĘ 5.0	Student wykonuje w pełni samodzielnie wszystkie czynności związane z przygotowaniem danych i uruchamianiem obliczeń
EFEKT KSZTAŁCENIA 4	
NA OCENĘ 3.0	Student nie potrafi samodzielnie interpretować wyników obliczeń - wymaga dużej pomocy prowadzącego
NA OCENĘ 4.0	Student samodzielnie interpretuje część wyników obliczeń - w pozostałych przypadkach wymaga pomocy prowadzącego
NA OCENĘ 5.0	Student w pełni samodzielnie interpretuje wszystkie wyniki obliczeń

10 MACIERZ REALIZACJI PRZEDMIOTU

EFEKT KSZTAŁCENIA	ODNIESIENIE DANEGO EFEKTU DO SZCZEGÓŁOWYCH EFEKTÓW ZDEFINIOWANYCH DLA PROGRAMU	CELE PRZEDMIOTU	TREŚCI PROGRAMOWE	NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE	SPOSOBY OCENY
EK1	K2_W01	Cel 1	W1 W2 W3 K1	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3
EK2	K2_W01 K2_W07 b	Cel 1	W1 W2 W3 W4 W5 K1	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3
EK3	K2_U01 b K2_U07 b	Cel 1	W1 W2 W3 W4 W5 K1	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3
EK4	K2_U01 b K2_U07 b	Cel 1	W1 W2 W3 W4 W5 K1	N1 N2 N3 N4 N5	P1 P2 P3

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
- [4] | **P. Bladon, J. Gorton, R. B. Hammond** — *Molecular Modelling: Computational Chemistry Demystified*, , 2011, Royal Society of Chemistry
- [5] | **H.-D. Holtje** — *Molecular Modeling: Basic Principles and Applications*, , 2008, Wiley-VCH
- [6] | **G. Schneider, K.-H. Baringhaus** — *Molecular Design: Concepts and Applications*, , 2008, Wiley-VCH

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

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 prof. dr hab. inż. Jarosław Handzlik (kontakt: jhandz@pk.edu.pl)

2 dr inż. Paweł Śliwa (kontakt: pawel.sliwa@pk.edu.pl)

13 ZATWIERDZENIE KARTY PRZEDMIOTU DO REALIZACJI

(miejsowość, data)

(odpowiedzialny za przedmiot)

(dziekan)

PRZYJMUJĘ DO REALIZACJI (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

.....

.....