



Karta przedmiotu

| | | | | | | | |
|--|---|---|---|------------------------|--|-----------------------|-------|
| Nazwa i kod przedmiotu | Modelowanie procesów katalitycznych, PG_00035160 | | | | | | |
| Kierunek studiów | Inżynieria i technologie nośników energii | | | | | | |
| Data rozpoczęcia studiów | luty 2022 r. | Rok akademicki realizacji przedmiotu | | | 2022/2023 | | |
| Poziom kształcenia | II stopnia | Grupa zajęć | | | Grupa zajęć fakultatywnych Grupa zajęć powiązanych z praktycznym przygotowaniem zawodowym - profil praktyczny | | |
| Forma studiów | stacjonarne | Sposób realizacji | | | na uczelni | | |
| Rok studiów | 1 | Język wykładowy | | | polski | | |
| Semestr studiów | 2 | Liczba punktów ECTS | | | 3.0 | | |
| Profil kształcenia | praktyczny | Forma zaliczenia | | | zaliczenie | | |
| Jednostka prowadząca | Wydział Chemiczny -> Katedra Chemii Fizycznej | | | | | | |
| Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców) | Odpowiedzialny za przedmiot | | | | | | |
| | Prowadzący zajęcia z przedmiotu | | | | | | |
| Formy zajęć i metody nauczania | Forma zajęć | Wykład | Ćwiczenia | Laboratorium | Projekt | Seminarium | RAZEM |
| | Liczba godzin zajęć | 15.0 | 0.0 | 30.0 | 0.0 | 0.0 | 45 |
| | W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0 | | | | | | |
| Aktywność studenta i liczba godzin pracy | Aktywność studenta | Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów | | Udział w konsultacjach | | Praca własna studenta | RAZEM |
| | Liczba godzin pracy studenta | 45 | | 3.0 | | 27.0 | 75 |
| Cel przedmiotu | Celem przedmiotu jest zaznajomienie studenta z zagadnieniem modelowania molekularnego procesów katalitycznych, ze szczególnym uwzględnieniem praktycznych aspektów prowadzenia symulacji komputerowych. | | | | | | |
| Efekty uczenia się przedmiotu | Efekt kierunkowy | | Efekt z przedmiotu | | Sposób weryfikacji i oceny efektu | | |
| | [K7_U05] potrafi przy formułowaniu i rozwiązywaniu złożonych zadań inżynierskich, w tym zadań nietypowych, a także prostych problemów badawczych zastosować podejście systemowe, uwzględniające także aspekty pozatechniczne. | | Student potrafi powiązać eksperymentalny proces katalityczny z jego mechanizmem molekularnym oraz proponuje symulacyjne podejście do weryfikacji jego przebiegu. | | [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu [SU2] Ocena umiejętności analizy informacji | | |
| | [K7_U06] potrafi przy formułowaniu i rozwiązywaniu złożonych zadań inżynierskich, w tym zadań nietypowych, a także prostych problemów badawczych dokonać wstępnej oceny ekonomicznej proponowanych rozwiązań i podejmowanych działań inżynierskich. | | Student dobiera metodę obliczeniową adekwatną do rozwiązania postawionego zagadnienia symulacyjnego uwzględniając złożoność obliczeniową problemu i czasochłonność wymaganych obliczeń. | | [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU2] Ocena umiejętności analizy informacji | | |
| | [K7_U07] potrafi dokonać krytycznej analizy istniejących rozwiązań technicznych oraz zaproponować ich ulepszenia (usprawnienia). | | Student analizuje badane procesy katalityczne pod kątem molekularnych modyfikacji reagentów zapewniających osiągnięcie lepszej wydajności lub selektywności procesu. | | [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU1] Ocena realizacji zadania | | |

| | | | |
|---|--|--|-------------------------|
| Treści przedmiotu | <ol style="list-style-type: none"> Powtórzenie wiadomości z kinetyki chemicznej: rząd reakcji chemicznej, szybkość reakcji, stała szybkości i metody jej wyznaczania, wyznaczanie rzędowości reakcji, reakcje złożone, przybliżenie stanu stacjonarnego, zależność stałej szybkości od temperatury, równanie Arrheniusa, energia aktywacji, teoria zderzeń aktywnych, teoria stanu przejściowego i wyznaczanie stałej szybkości, reakcje w roztworach Powtórzenie wiadomości z fizykochemii powierzchni: adsorpcja fizyczna i chemiczna, izoterm adsorpcji, izoterma Gibbsa, adsorpcja z roztworu, układy dyspersyjne Powtórzenie wiadomości z katalizy: katalizatory i centra aktywne, kataliza homogeniczna, autokataliza, kataliza heterogeniczna (budowa katalizatorów, katalizatory metaliczne, katalizatory półprzewodnikowe, etapy reakcji katalizowanej) Przegląd metod chemii obliczeniowej: mechanika molekularna, dynamika molekularna, metoda Hartree-Focka, równania Kohna-Shama, teoria funkcjonalu gęstości, metody półempiryczne, pola siłowe, metody hybrydowe QM/MM i ONIOM Obliczenia termochemiczne: optymalizacja geometrii układu, analiza wibracyjna, wielkości termochemiczne, termodynamika reakcji chemicznych, optymalizacja do stanu przejściowego, obliczanie stałej szybkości reakcji Sposoby modelowania powierzchni: sieć prosta i odwrotna, periodyczne warunki brzegowe, fale Blocha, strefa Brillouina, struktura pasmowa, poziom Fermiego i przerwa energetyczna, gęstość stanów, problemy obliczeniowe (metoda GW, model Hubbarda) Efekty solwatacyjne: model polaryzowalnego kontinuum (PCM), model COSMO, modele klasterek-kontinuum, solwatacja na poziomie cząsteczkowym Deskryptory molekularne w modelowaniu: analiza populacyjna, potencjał elektrostatyczny, orbitale zlokalizowane, analiza rzędowości wiązań, indeksy reaktywności chemicznej (potencjał chemiczny, twardość, indeks elektrofilowości, funkcje Fukui) Modelowanie ścieżek reakcji: definicja współrzędnej reakcji, wewnętrzna współrzędna reakcji (metoda IRC), hiperpowierzchnia energii potencjalnej, dynamika zdarzeń rzadkich, eksploracja hiperpowierzchni energii swobodnej (metody perturbacyjne, całkowanie termodynamiczne, umbrella sampling, metoda ABF, wymiana replik, metadynamika) Przykłady modelowania procesów katalitycznych: utlenianie metanolu, alkilowanie benzenu, polimeryzacja olefin, katalizatory DeSOx i DeNOx, epoksydacja i in. Przykłady oprogramowania: klasyczna dynamika molekularna, chemia kwantowa, dynamika molekularna ab initio | | |
| Wymagania wstępne i dodatkowe | Opanowany materiał z matematyki i fizyki w zakresie podstawowego kursu akademickiego na studiach I stopnia. Podstawowa znajomość kinetyki chemicznej. Zalecane: wstępne wiadomości z zakresu chemii lub fizyki kwantowej. | | |
| Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się | Sposób oceniania (składowe) | Próg zaliczeniowy | Składowa oceny końcowej |
| | test otwarty z materiału wykładowego | 50.0% | 50.0% |
| | sprawozdania z zajęć laboratoryjnych | 50.0% | 50.0% |
| Zalecana lista lektur | Podstawowa lista lektur | <ol style="list-style-type: none"> P. W. Atkins, Chemia fizyczna, PWN, Warszawa 2001. K. Pigoń, Z. Ruziewicz, Chemia fizyczna 1. Podstawy fenomenologiczne, PWN, Warszawa 2005. K. Pigoń, Z. Ruziewicz, Chemia fizyczna 2. Fizykochemia molekularna, PWN, Warszawa 2005. | |
| | Uzupełniająca lista lektur | <ol style="list-style-type: none"> A. Molski, Wprowadzenie do kinetyki chemicznej, WN-T, Warszawa 2001. E. T. Dutkiewicz, Fizykochemia powierzchni, WN-T, Warszawa 1998. L. Piela, Idee chemii kwantowej, PWN, Warszawa 2003 R. F. Nalewajski, Podstawy i metody chemii kwantowej. Wykłady, PWN, Warszawa 2001. A. Kaczmarek-Kędziera, M. Ziegler-Borowska, D. Kędziera, Chemia obliczeniowa w laboratorium organicznym, Wydawnictwo Naukowe UMK, Toruń 2014. | |
| | Adresy eZasobów | Adresy na platformie eNauczanie: | |
| Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania | | | |
| Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu | Nie dotyczy | | |