

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Modelowanie procesów katalitycznych, PG_00035160						
Kierunek studiów	Inżynieria i technologie nośników energii						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu	2024/2025				
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	dr hab. inż. Maciej Śmiechowski					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu	dr hab. inż. Maciej Śmiechowski					
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_W09] zna i rozumie podstawowe procesy katalityczne wykorzystywane na skalę przemysłową, zna i rozumie w pogłębionym stopniu - wybrane procesy katalitycznej przeróbki nośników energii, z uwzględnieniem aparatury, katalizatorów, głównych reakcji chemicznych i warunków procesowych oraz dotyczące ich metody i teorie wyjaśniające złożone zależności między nimi, stanowiące zaawansowaną wiedzę ogólną z zakresu chemii, fizyki, matematyki oraz inżynierii i technologii chemicznej, tworzących podstawy teoretyczne, uporządkowaną i podbudowaną teoretycznie wiedzę obejmującą kluczowe zagadnienia oraz wybrane zagadnienia z zakresu zaawansowanej wiedzy szczegółowej w obszarze katalizy reakcji chemicznych	Student zna i rozumie mechanizm molekularny podstawowych procesów katalitycznych stosowanych w technologii chemicznej, zwłaszcza z zakresu katalizy heterogenicznej.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej
	[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.	[SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu
	[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.	[SU1] Ocena realizacji zadania [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi
	[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.	[SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi
Treści przedmiotu	<ol style="list-style-type: none"> 1. Powtórzenie wiadomości z kinetyki chemicznej: rząd reakcji chemicznej, szybkość reakcji, stała szybkości i metody jej wyznaczenia, wyznaczenie rzędowości reakcji, reakcje złożone, przybliżenie stanu stacjonarnego, zależność stałej szybkości od temperatury, równanie Arrheniusa, energia aktywacji, teoria zderzeń aktywnych, teoria stanu przejściowego i wyznaczenie stałej szybkości, reakcje w roztworach 2. Powtórzenie wiadomości z fizykochemii powierzchni: adsorpcja fizyczna i chemiczna, izotermy adsorpcji, izoterma Gibbsa, adsorpcja z roztworu, układy dyspersyjne 3. Powtórzenie wiadomości z katalizy: katalizatory i centra aktywne, kataliza homogeniczna, autokataliza, kataliza heterogeniczna (budowa katalizatorów, katalizatory metaliczne, katalizatory półprzewodnikowe, etapy reakcji katalizowanej) 4. Przegląd metod chemii obliczeniowej: mechanika molekularna, dynamika molekularna, metoda Hartree-Focka, równania Kohna-Shama, teoria funkcjonału gęstości, metody półempiryczne, pola siłowe, metody hybrydowe QM/MM i ONIOM 5. Obliczenia termochemiczne: optymalizacja geometrii układu, analiza wibracyjna, wielkości termochemiczne, termodynamika reakcji chemicznych, optymalizacja do stanu przejściowego, obliczanie stałej szybkości reakcji 6. 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) 7. Efekty solwatacyjne: model polaryzowalnego kontinuum (PCM), model COSMO, modele klaster-kontinuum, solwatacja na poziomie cząsteczkowym 8. Deskrytory molekularne w modelowaniu: analiza populacyjna, potencjał elektrostatyczny, orbitale zlokalizowane, analiza rzędowości wiązań, indeksy reaktywności chemicznej (potencjał chemiczny, twardość, indeks elektrofilowości, funkcje Fukui) 9. 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) 10. Przykłady modelowania procesów katalitycznych: utlenianie metanolu, alkilowanie benzenu, polimeryzacja olefin, katalizatory DeSOx i DeNOx, epoksydacja i in. 11. 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
	sprawozdania z zajęć laboratoryjnych	50.0%	50.0%
	test otwarty z materiału wykładowego	50.0%	50.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> 1. P. W. Atkins, Chemia fizyczna, PWN, Warszawa 2001. 2. K. Pigoń, Z. Ruziewicz, Chemia fizyczna 1. Podstawy fenomenologiczne, PWN, Warszawa 2005. 3. K. Pigoń, Z. Ruziewicz, Chemia fizyczna 2. Fizykochemia molekularna, PWN, Warszawa 2005. 	
	Uzupełniająca lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> 1. A. Molski, Wprowadzenie do kinetyki chemicznej, WN-T, Warszawa 2001. 2. E. T. Dutkiewicz, Fizykochemia powierzchni, WN-T, Warszawa 1998. 3. L. Piela, Idee chemii kwantowej, PWN, Warszawa 2003 4. R. F. Nalewajski, Podstawy i metody chemii kwantowej. Wykłady, PWN, Warszawa 2001. 5. A. Kaczmarek-Kędziera, M. Ziegler-Borowska, D. Kędziera, Chemia obliczeniowa w laboratorium organicznym, Wydawnictwo Naukowe UMK, Toruń 2014. 	
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie: Modelowanie procesów katalitycznych - Moodle ID: 39660 https://enauzanie.pg.edu.pl/moodle/course/view.php?id=39660	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<ol style="list-style-type: none"> 1. Zdefiniuj ciągłą funkcję Fukui oraz jej trzy aproksymacje dyskretne. Powiąż reaktywność molekuly względem substytucji różnego typu z odpowiednimi funkcjami dyskretnymi. 2. Optymalizacja geometrii układu kwantowochemicznego doprowadziła do znalezienia punktu stacjonarnego. Jak odróżnić, czy jest to lokalne minimum energetyczne, czy też stan przejściowy? Jak można przewidzieć kierunek deformacji stanu przejściowego do struktury stabilnej? 3. Opisz krótko zastosowania modelu polaryzowalnego kontinuum (PCM) w modelowaniu cząsteczek w roztworze. 4. Zdefiniuj poziom Fermiego dla ciała stałego. W oparciu o jego położenie podziel ciała stałe na przewodniki/półprzewodniki/izolatory. 5. Opisz ideę i zastosowania metody wewnętrznej współrzędnej reakcji (IRC). 6. Wymień i krótko scharakteryzuj trzy metody analizy populacyjnej. 7. Omów poszczególne szczeble "drabiny Jakubowej" funkcjonalów gęstości elektronowej. 8. Omów zastosowanie metadynamiki w eksploracji powierzchni energii potencjalnej układu, w którym zachodzi reakcja chemiczna. 9. Podaj treść II twierdzenia Hohenberga-Kohna. 10. Omów podstawowe elementy typowego giętkiego pola siłowego stosowanego w mechanice molekularnej. 		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.