POLITECHNIKA GDAŃSKA

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Modelowanie procesów katalitycznych, PG_00066239		
Kierunek studiów	Inżynieria i technologie nośników energii		
Data rozpoczęcia studiów	luty 2027 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu	2027/2028
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	Wydziały Politechniki Gdańskiej -> Wydział Chemiczny -> Katedra Chemii Fizycznej		
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	dr hab. inż. Maciej Śmiechowski	
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu		

Formy zajęć

Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
Liczba godzin zajęć	10.0	0.0	30.0	0.0	0.0	40
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	40	10.0	25.0	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_W05] rozpoznaje i opisuje zjawiska z zakresu fizyki i chemii, obejmującą elementy inżynierii chemicznej, niezbędne do przewidzenia przebiegu procesu technologicznego.	Student zna i rozumie mechanizm molekularny podstawowych procesów katalitycznych stosowanych w technologii chemicznej, zwłaszcza z zakresu katalizy heterogenicznej.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej
[K7_U02] potrafi planować i przeprowadzać eksperymenty, interpretować uzyskane wyniki i wyciągać wnioski	Student dobiera metodę obliczeniową adekwatną do rozwiązania postawionego zagadnienia symulacyjnego uwzględniając złożoność obliczeniową problemu i czasochłonność wymaganych obliczeń.	[SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU1] Ocena realizacji zadania
[K7_U05] analizuje sposoby funkcjonowania urządzeń, aparatury i linii technologicznych stosowanych w technologiach związanych z wytwarzaniem energii,	Student analizuje badane procesy katalityczne pod kątem molekularnych modyfikacji reagentów zapewniających osiągnięcie lepszej wydajności lub selektywności procesu.	[SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu
[K7_U06] projektuje - zgodnie z zadaną specyfikacją, uwzględniającą aspekty pozatechniczne - złożony proces technologiczny, związany z inżynierią i technologiami nośników energii	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

Treści przedmiotu

Treści przedmiotu - wykład

1. 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
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. Deskryptory 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 osiąganych 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	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	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	

Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania

1. Zdefiniuj ciągłą funkcję Fukui oraz jej trzy aproksymacje dyskretne. Powiąż reaktywność molekuły 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" funkcjonałów 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.

Zajęcia praktyczne w ramach przedmiotu

Nie dotyczy

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.