

## KARTA MODUŁU (sylabus)

1. Nazwa modułu: <b>METODY OBLICZENIOWE W CHEMII</b>		2. punkty ECTS
		<b>5</b>
		3. kod ECTS
		<b>S/N1ChO-F-METOBli-IV</b>
4. Kierunek studiów: <b>Chemia ogólna</b>	5. Ścieżka kształcenia: -	
6. Semestr studiów: <b>IV</b>	7. Stopień: <b>studia I stopnia</b>	
8. Forma studiów: <b>studia stacjonarne/ studia niestacjonarne</b>	9. Język wykładowy: <b>polski</b>	
10. Status modułu: <b>fakultatywny</b>	11. Sposób zaliczenia: <b>zaliczenie</b>	
12. Grupa: <b>moduł fakultatywny do wyboru</b>		
13. Forma zajęć	14. Metody dydaktyczne	15. Sposób realizacji zajęć
<b>wykład</b>	<b>wykład z prezentacją multimedialną</b>	<b>zajęcia prowadzone w salach dydaktycznych</b>
<b>ćwiczenia audytoryjne</b>	<b>ćwiczenia audytoryjne: analiza przypadków/ praca w grupach/ dyskusja/ rozwiązywanie zadań</b>	<b>zajęcia prowadzone w salach dydaktycznych/ zajęcia prowadzone w salach informatycznych</b>
16. Cele i zadania modułu: <b>1. Nabycie przez studentów podstaw teoretycznych i praktycznych z zakresu metod obliczeniowych stosowanych do rozwiązywania prostych i złożonych problemów inżynierskich w obszarze studiowanego kierunku studiów.</b>		
17. Wymagania formalne: <b>1. Aktywne uczestnictwo w zajęciach.</b> <b>2. Obecność na zajęciach zorganizowanych w formie ćwiczeń audytoryjnych, możliwość usprawiedliwienia nieobecności na podstawie zwolnienia lekarskiego.</b>		
18. Wymagania wstępne: <b>1. Usystematyzowana wiedza z następujących modułów tj. Matematyka, Podstawy chemii teoretycznej, Technologia informacyjna.</b>		
19. Treści programowe:		
lp.	<b>W - wykład:</b>	
<b>W1</b>	Pojęcia podstawowe: stężenia (procentowe, molowe, normalne) i ułamki (masowe, molowe)	
<b>W2</b>	Bilansowanie reakcji chemicznych (bez równań redoks)	
<b>W3</b>	Sposoby podawania informacji o postępie reakcji	
<b>W4</b>	Obliczanie właściwości fizycznych substancji w przypadku braku danych (metoda Dühringa)	
<b>W5</b>	Równanie ciągłości strugi. Liczba Reynoldsa	
<b>W6</b>	Rodzaje bilansów procesów chemicznych. Bilans materiałowy dla aparatu i procesu (strumień wylotowy, strumień wlotowy i akumulacja). Bilans cieplny dla aparatu i procesu. Metody prezentowania bilansów	
<b>W7</b>	Metody prowadzenia procesów w skali laboratoryjnej i przemysłowej. Etapy powiększania skali procesu chemicznego	
lp.	<b>C – ćwiczenia:</b>	

<b>C1</b>	Algebraiczne uzgadnianie reakcji chemicznych
<b>C2</b>	Informacje o postępie reakcji w czasie (stopień konwersji, względny stopień konwersji, liczba postępu reakcji, selektywność, wydajność reakcji)
<b>C3</b>	Prognozowania właściwości chemikaliów (reguły empiryczne, HLB)
<b>C4</b>	Obliczanie właściwości fizycznych substancji w przypadku braku danych (reguły empiryczne, metoda Dühringa)
<b>C5</b>	Równanie ciągłości strugi. Liczba Reynoldsa
<b>C6</b>	Bilans materiałowy dla aparatu i procesu. Bilans cieplny dla aparatu i procesu. Wykres Sankey'a dla bilansu materiałowego
<b>C7</b>	Rachunek błędu w chemii

#### 20. Zakładane efekty uczenia się:

**Wiedza:** *zbiór opisów, faktów, zasad, teorii i praktyk, przyswojonych w procesie uczenia się, odnoszących się do dziedziny uczenia się lub działalności zawodowej*

Nr efektu	Efekt uczenia się - WIEDZA
	Student, który zaliczył moduł:
<b>01</b>	zna i charakteryzuje metody obliczeniowe stosowane do rozwiązywania złożonych problemów w obszarze studiowanego kierunku studiów.
<b>02</b>	ma elementarną wiedzę o specjalistycznych programach komputerowych wspomagających procesy obliczeniowe w chemii.

**Umiejętności:** *zdolność wykonywania zadań i rozwiązywania problemów właściwych dla dziedziny uczenia się lub działalności zawodowej*

Nr efektu	Efekt uczenia się - UMIEJĘTNOŚCI
	Student, który zaliczył moduł:
<b>03</b>	potrafi wykorzystać zdobytą wiedzę do rozwiązywania złożonych problemów inżynierskich, jak i prostych obliczeń chemicznych.
<b>04</b>	potrafi korzystać z wybranych programów komputerowych wspomagających procesy obliczeniowe w chemii.
<b>05</b>	korzysta z dostępnej literatury i innych źródeł wiedzy pozwalających na prawidłowe zrozumienie zagadnień z zakresu metod obliczeniowych stosowanych w chemii.
<b>06</b>	ma umiejętność samokształcenia.

**Kompetencje społeczne:** *zdolność do kształtowania własnego rozwoju oraz autonomicznego i odpowiedzialnego uczestnictwa w życiu zawodowym i społecznym, z uwzględnieniem etycznego kontekstu własnego postępowania*

Nr efektu	Efekt uczenia się - KOMPETENCJE
	Student, który zaliczył moduł:
<b>07</b>	prawidłowo ocenia poziom posiadanej przez siebie wiedzy oraz rozumie potrzebę jej ustawicznego rewidowania i pogłębiania.
<b>08</b>	potrafi wykorzystać zdobytą wiedzę do ugruntowania swojej pozycji na rynku pracy.

#### 21. Sposoby oceny:

**F** – formująca:

**F3-sprawdzian**

**F5-odpowiedź ustna**

**P** – podsumowująca:

**P3-średnia ocen zdobytych w czasie semestru**

**P4-zaliczenie na ocenę**

#### 22. Sposób weryfikacji efektów uczenia się:

Nr efektu	Treści programowe	Sposób oceny
<b>01</b>	<b>W1-W7, C1-C7</b>	<b>F3, F5, P3, P4</b>
<b>02</b>	<b>W1-W7, C1-C7</b>	<b>F5, P3</b>
<b>03</b>	<b>W1-W7, C1-C7</b>	<b>F3, F5, P3, P4</b>
<b>04</b>	<b>W1-W7, C1-C7</b>	<b>F5, P3</b>
<b>05</b>	<b>W1-W7, C1-C7</b>	<b>F3, F5, P3, P4</b>
<b>06</b>	<b>W1-W7, C1-C7</b>	<b>F3, F5, P3, P4</b>
<b>07</b>	<b>W1-W7, C1-C7</b>	<b>F3, F5, P3, P4</b>
<b>08</b>	<b>W1-W7, C1-C7</b>	<b>F3, F5, P3, P4</b>

#### 23. Warunek zaliczenia modułu:

Uzyskanie pozytywnej oceny końcowej jest uzależnione od pozytywnych ocen z odpowiedzi ustnych oraz śródsesemestralnych sprawdzianów. Ponadto na ostatnich zajęciach w semestrze studenci przystępują do zaliczenia pisemnego, dla którego obowiązuje następująca skala ocen:

<i>Dostateczny</i>	<i>Dostateczny plus</i>	<i>Dobry</i>	<i>Dobry plus</i>	<i>Bardzo dobry</i>
--------------------	-------------------------	--------------	-------------------	---------------------

50-59%	60-69%	70-79%	80-89%	90-100%
Ocenę końcową stanowi średnia ocen zdobytych w czasie semestru.				
24. Całkowity nakład pracy studenta potrzebny do osiągnięcia efektów uczenia się w godzinach oraz punktach ECTS:				
Ogółem stacjonarne	Ogółem niestacjonarne	stacjonarne	niestacjonarne	
125 h	125 h	5 ECTS		
- w tym liczba punktów ECTS za godziny kontaktowe z bezpośrednim udziałem nauczyciela akademickiego		2 ECTS	1,44 ECTS	
- w tym liczba punktów ECTS za godziny realizowane w formie samodzielnej pracy		3 ECTS	3,56 ECTS	
25. Wykaz literatury podstawowej (wykorzystywana podczas zajęć i studiowana samodzielnie przez studenta)				
1. Bogaczek R., Kociołek-Balawejder E., Technologia chemiczna organiczna – wybrane zagadnienia, Wrocław 2013.				
2. Biernacka A., Dankiewicz-Wisz A., Krytów M., Obliczenia chemiczne w chemii środowiska, Kraków 2022.				
3. Krawczyk K., Schmidt-Szałowski K., Obliczenia technologiczne w przemyśle chemicznym, Warszawa 2023.				
26. Wykaz literatury uzupełniającej:				
1. Kaczmarek-Kędziera A., Ziegler-Borowska M., Kędziera D., Chemia obliczeniowa w laboratorium organicznym, Toruń 2014.				
2. Zieliński R., Surfactanty: budowa, właściwości, zastosowania, 2021.				
3. Leitner R., Zarys matematyki wyższej dla studentów”. Warszawa 2024.				