

(pieczęć wydziału)

KARTA PRZEDMIOTU

Z1-PU7

WYDANIE N1

Strona 1 z 2

1. Nazwa przedmiotu: Podstawy Chemii Komputerowej		2. Kod przedmiotu:					
3. Karta przedmiotu ważna od roku akademickiego: 2013/14							
4. Forma kształcenia: studia pierwszego stopnia							
5. Forma studiów: studia stacjonarne							
6. Kierunek studiów: Inżynieria chemiczna i procesowa							
7. Profil studiów: ogólnoakademicki							
8. Specjalność: -							
9. Semestr: III							
10. Jednostka prowadząca przedmiot: Katedra Fizykochemii i Technologii Polimerów							
11. Prowadzący przedmiot: koordynator przedmiotu: prof. dr hab. inż. Mieczysław Łapkowski ćwiczenia laboratoryjne: Przemysław Ledwoń, Paweł Zassowski							
12. Przynależność do grupy przedmiotów: przedmioty wspólne							
13. Status przedmiotu: obowiązkowy							
14. Język prowadzenia zajęć: polski							
15. Przedmioty wprowadzające oraz wymagania wstępne: matematyka, chemia ogólna i nieorganiczna							
16. Cel przedmiotu: Dzięki uczestnictwu w zajęciach studenci zapoznają się i nabierają umiejętności stosowania i interpretacji wyników obliczeń uzyskanych metodami chemii komputerowej, zasad i praw leżących u podstaw inżynierii chemicznej i procesowej, praw równowag chemicznych i fazowych, kinetyki, analizy statystycznej wyników pomiarowych i obliczeń oraz pozyskiwania, przetwarzania i interpretacji informacji z baz fizykochemicznych i materiałowych.							
17. Efekty kształcenia: ¹							
Nr	Opis efektu kształcenia	Metoda sprawdzenia efektu kształcenia	Forma prowadzenia zajęć	Odniesienie do efektów dla kierunku studiów			
1	Zna podstawowe prawa termodynamiki, statyki i kinetyki chemicznej i potrafi je zastosować w obliczeniach i symulacjach procesowych	kolokwium zaliczeniowe	ćwiczenia laboratoryjne	K1A_W10 ++ K1A_W07 ++			
2	Potrafi opracować za pomocą arkusza kalkulacyjnego model zjawiska i przeprowadzić jego symulację w zależności od zmieniających się zadanych parametrów	kolokwium zaliczeniowe	ćwiczenia laboratoryjne	K1A_U02 ++ K1A_U05 +++ K1A_U12 ++			
3	Potrafi przeprowadzić obliczenia szybkości reakcji chemicznych oraz składu mieszaniny reakcyjnej dla określonych warunków prowadzenia procesu oraz wyszukać niezbędne informacje w bazach wielkości fizykochemicznych	kolokwium zaliczeniowe	ćwiczenia laboratoryjne	K1A_U01 ++ K1A_U06 ++			
4	Potrafi przeprowadzić analizę statystyczną i interpretację modelowanych wyników i obliczeń	kolokwium zaliczeniowe	ćwiczenia laboratoryjne	K1A_U01 ++ K1A_U05 ++			
5	Rozumie potrzebę dokończenia się, uzupełniania i poszerzania swojej wiedzy	kolokwium zaliczeniowe	ćwiczenia laboratoryjne	K1A_U04 ++			
18. Formy zajęć dydaktycznych i ich wymiar (liczba godzin) semestr 3 L. 15 h							

¹

należy wskazać ok. 5 – 8 efektów kształcenia

19. Treści kształcenia:

1. Opracowanie modeli procesów i dynamicznych zjawisk fizykochemicznych oraz symulacja ich przebiegu w różnych warunkach z zastosowaniem arkusza kalkulacyjnego.
2. Wykorzystanie bazkomputerowego wspomaganie selekcji materiałów (CAMPUS, Computer Aided Material Preselection by Uniform Standards) oraz The NIST Chemistry WebBook (National Institute of Standards and Technology, USA) zawierających informacje na temat tworzyw sztucznych, ich właściwości użytkowych i fizykochemicznych (oznaczonych wg obowiązujących norm ISO), właściwości spektroskopowych, sposobu przetwórstwa, reaktywności, zastosowania oraz dostępności na rynku jako narzędzi do selekcji odpowiedniego tworzywa do określonych warunkach eksploatacji.
3. Pozyskiwanie i interpretacja informacji z fizykochemicznych baz danych właściwości związków chemicznych.
4. Analiza statystyczna i interpretacja danych pomiarowych. Programy do opisu przebiegu i tworzenia schematów procesów.

Warunkiem uzyskania zaliczenia jest wykonanie i zaliczenie wszystkich przewidzianych w harmonogramie ćwiczeń. Każde ćwiczenie laboratoryjne oceniane jest oddzielnie. Ocena końcowa jest średnia arytmetyczną ocen z poszczególnych ćwiczeń.

20. Egzamin: nie**21. Literaturapodstawowa:**

1. Dynamic Models in Biochemistry, D. Atkinson, S. Clarke, D. Rees, D. Barkley, The Benjamin Cummings Publishing Company, Inc., 1987
2. 2000 Solved Problems in Mechanical Engineering Thermodynamics, P. Liley, McGraw-Hill Publishing Company, 1989
3. Physical Chemistry Calculations with Excel, Visual Basic, Visual Basic for Applications, Mathcad, Mathematica, R. J. Sime, Pearson Education, Inc. and Benjamin Cummings, Inc., 2005
4. An Introduction to Computational Biochemistry, C. Stan Tsai, Wiley-Liss, 2002
5. Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering, D. Himmelblau, Prentice Hall, Inc., 1989

22. Literaturauzupelniająca:

1. A practical Guide to data Analysis for Physical Science Students, L. Lyons, Cambridge University Press, 1991
2. Obliczenia fizykochemiczne na Twoim PC, W. Ufnalski, WNT, 1997
3. Biostatistics. A Foundation for Analysis in the Health Science, W. Daniel, Wiley Inc., 2005

23. Nakład pracy studenta potrzebny do osiągnięcia efektów kształcenia

Rodzaj zajęć	Liczba godzin kontaktowych/pracy studenta
ćwiczeni laboratoryjne	15/15

24. Suma wszystkich godzin: 30**25. Liczba punktów ECTS: 2****26. Liczba punktów ECTS uzyskanych na zajęciach z bezpośrednim udziałem nauczyciela akademickiego¹****27. Liczba punktów ECTS uzyskanych na zajęciach o charakterze praktycznym (laboratoria, projekty) 1****26. Uwagi:**

Zatwierdzono:

.....
(data i podpis prowadzącego)

.....
(data i podpis Kierownika Katedry)