

Przedmiot: Modelowanie procesów w nanoskali

Kod przedmiotu: WTiCh/ISt/ICCh/D-2a

1. Odpowiedzialny za przedmiot, jego miejsce zatrudnienia i e-mail:

dr inż. Bogdan Ambrożek, Zakład Inżynierii Procesowej, Informatyki Procesowej i Ochrony Atmosfery, Instytut Inżynierii Chemicznej i Procesów Ochrony Środowiska
e-mail: ambog@ps.pl

2. Język wykładowy: polski

3. Liczba punktów: 5

4. Rodzaj studiów, kierunek, specjalność: studia I stopnia, stacjonarne, kierunek Inżynieria Chemiczna i Procesowa

5. Status przedmiotu dla ww. studiów: obieralny

6. Informacje o formach zajęć:

Sem.	Pkt	Zajęcia praktyczne									
		Wykład		Seminarium		Ćw/ćw. komp.		Laboratorium		Projekt	
		G/sem	F.z.	G/sem	F.z.	G/sem	F.z.	G/sem	F.z.	G/sem	F.z.
VI	5	30	E					30	Z		
Waga		0,6						0,4			

Objaśnienia: Pkt – liczba punktów, G/sem. – liczba godzin w semestrze, F.z. – forma zaliczenia zajęć (E – egzamin, Z – zaliczenie). Ćw. komp – zajęcia w formie ćwiczeń, na stanowiskach komputerowych

7. Wymagane zaliczenie przedmiotów poprzedzających (lub określenie wymaganej wiedzy): matematyka, fizyka, podstawy informatyki, termodynamika procesowa, kinetyka procesowa

8. Program wykładów

Układy w nanoskali. Materiały nanostrukturalne; nanomateriały punktowe, nanomateriały jedno-, dwu- i trójwymiarowe. Nanocząsteczki i inne nanoobiekty. Nanootwory i nanopory. Nanorurki węglowe. Własności fizyczne nanomateriałów. Teoretyczne i obliczeniowe aspekty modelowanie układów w nanoskali. Dynamika molekularna. Metody Monte Carlo. Mechanika kwantowa. Matematyczne i numeryczne algorytmy obliczeniowe. Programy stosowane do modelowania procesów w nanoskali. Projektowanie molekularne materiałów nanostrukturalnych. Modelowanie nanostrukturalnych adsorbentów. Modelowanie układów koloidalnych. Modelowanie wymiany ciepła w nanoskali. Modelowanie katalizy heterogenicznej. Przewidywanie równowagowych i dynamicznych własności układów.

9. Program zajęć praktycznych

Obsługa wybranych programów stosowanych do modelowania w nano skali. Wykonywanie obliczeń za pomocą programów opracowanych w językach programowania Fortran i C++. Modelowanie wybranych układów: nanostrukturalne adsorbenty, kataliza heterogeniczna, układy koloidalne.

10. Literatura

1. W.A. Goddard III, D.W. Brenner, S. E. Lyshevski, G.J. Iafrate (Eds), *Handbook of Nanoscience, Engineering, and Technology*. CRC Press, Boca Raton 2007.
2. S. Volz (Ed.), *Microscale and Nanoscale Heat Transfer*. Springer-Verlag, Berlin 2007.
3. N. Quirke (Ed.), *Adsorption and Transport at the Nanoscale*. CRC Press, Boca Raton 2006.
4. M. P. Allen, D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*. Oxford Science Publications, Oxford 1987.
5. D. Frenkel, B. Smit, *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*. Academic Press, San Diego, 2002.