

# ΕΤΥ 910 Εισαγωγή σε Προηγμένες Μεθόδους Υπολογισμού στην Επιστήμη των Υλικών

## (1) ΓΕΝΙΚΑ

<b>ΣΧΟΛΗ</b>	ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ		
<b>ΤΜΗΜΑ</b>	ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΥΛΙΚΩΝ		
<b>ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ</b>	ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΟ		
<b>ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ</b>	ΕΤΥ 910	<b>ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ</b>	9 <sup>ο</sup>
<b>ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ</b>	ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΕ ΠΡΟΧΩΡΗΜΕΝΕΣ ΜΕΘΟΔΟΥΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΥ ΣΤΗΝ ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ		
<b>ΑΥΤΟΤΕΛΕΙΣ ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ</b> <i>σε περίπτωση που οι πιστωτικές μονάδες απονέμονται σε διακριτά μέρη του μαθήματος π.χ. Διαλέξεις, Εργαστηριακές Ασκήσεις κ.λπ. Αν οι πιστωτικές μονάδες απονέμονται ενιαία για το σύνολο του μαθήματος αναγράψτε τις εβδομαδιαίες ώρες διδασκαλίας και το σύνολο των πιστωτικών μονάδων</i>	<b>ΕΒΔΟΜΑΔΙΑΙΕΣ ΩΡΕΣ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ</b>	<b>ΠΙΣΤΩΤΙΚΕΣ ΜΟΝΑΔΕΣ</b>	
Διαλέξεις και Εργαστηριακές Ασκήσεις	3	3	
<i>Προσθέστε σειρές αν χρειαστεί. Η οργάνωση διδασκαλίας και οι διδακτικές μέθοδοι που χρησιμοποιούνται περιγράφονται αναλυτικά στο (δ).</i>			
<b>ΤΥΠΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ</b> <i>γενικού υποβάθρου, ειδικού υποβάθρου, ειδίκευσης γενικών γνώσεων, ανάπτυξης δεξιοτήτων</i>	Ειδίκευσης Γενικών Γνώσεων		
<b>ΠΡΟΑΠΑΙΤΟΥΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ:</b>	-		
<b>ΓΛΩΣΣΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ και ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ:</b>	Ελληνική		
<b>ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ ΠΡΟΣΦΕΡΕΤΑΙ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ERASMUS</b>	-		
<b>ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΣΕΛΙΔΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ (URL)</b>	<a href="http://ecourse.uoi.gr/course/view.php?id=1035">http://ecourse.uoi.gr/course/view.php?id=1035</a>		

## (2) ΜΑΘΗΣΙΑΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

### Μαθησιακά Αποτελέσματα

Περιγράφονται τα μαθησιακά αποτελέσματα του μαθήματος οι συγκεκριμένες γνώσεις, δεξιότητες και ικανότητες καταλλήλου επιπέδου που θα αποκτήσουν οι φοιτητές μετά την επιτυχή ολοκλήρωση του μαθήματος.

Συμβουλευτείτε το Παράρτημα Α

- Περιγραφή του Επιπέδου των Μαθησιακών Αποτελεσμάτων για κάθε ένα κύκλο σπουδών σύμφωνα με το Πλαίσιο Προσόντων του Ευρωπαϊκού Χώρου Ανώτατης Εκπαίδευσης
- Περιγραφικοί Δείκτες Επιπέδων 6, 7 & 8 του Ευρωπαϊκού Πλαισίου Προσόντων Διά Βίου Μάθησης και το Παράρτημα Β
- Περιληπτικός Οδηγός συγγραφής Μαθησιακών Αποτελεσμάτων

**Γνώσεις:** Στα πλαίσια του μαθήματος "Εισαγωγή σε προχωρημένες μεθόδους υπολογισμού στην

επιστήμη των υλικών" ο φοιτητής εκπαιδεύεται στις σύγχρονες υπολογιστικές θεωρίες που θα του επιτρέψουν να μελετήσει την ατομική και ηλεκτρονιακή δομή ενός υλικού με τη χρήση κβαντομηχανικών υπολογισμών. Αρχικά μελετούνται απλά κβαντομηχανικά προβλήματα και στη συνέχεια αναπτύσσονται σταδιακά τα πιο σύνθετα προβλήματα που σχετίζονται με ένα υλικό. Στόχος είναι η εύρεση των κατάλληλων θεωριών και προσεγγίσεων για την εύρεση της ηλεκτρονικής δομής ενός υλικού μέσω της προσπάθειας υπολογιστικής επίλυσης της εξίσωσης του Schrödinger για ένα σύστημα πολλών σωματιδίων υπό περιορισμούς και προϋποθέσεις.

**Ικανότητες:** Οι μέθοδοι αυτοί θα επιτρέψουν στο φοιτητή να είναι σε θέση να υπολογίζει τις δομικές, ηλεκτρικές, μαγνητικές και οπτικές ιδιότητες ενός υλικού αναλυτικά ή υπολογιστικά μέσω κατάλληλων λογισμικών.

Συγκεκριμένα στο τέλος του μαθήματος ο φοιτητής πρέπει να έχει αποκτήσει τις ακόλουθες **δεξιότητες:**

- υπολογίζει την ηλεκτρονιακή δομή ενός κρυστάλλου.
- υπολογίζει τις ιδιοτιμές και ιδιοκαταστάσεις την ενέργειας ενός απλού μορίου ή ενός συμπλόκου του.
- υπολογίζει την ηλεκτρονιακή δομή μιας περιοδικής αλυσίδας ή ενός δις-διάστατου πλέγματος και την εύρεση της μεταλλικής ή ημι-αγώγιμης ή μονωτικής συμπεριφοράς του.
- υπολογίζει τη μαγνητική ροπή ενός υλικού μέσω της σπιν ηλεκτρονιακής πυκνότητας καταστάσεων ενός υλικού
- υπολογίζει την οπτική απορρόφηση ενός μορίου ή ημιαγωγού.

Σημαντικό ρόλο παίζει η ενεργή συμμετοχή των φοιτητών στις ασκήσεις και στα προβλήματα και η περεταίρω εξοικείωση τους στα προγράμματα υπολογισμού στον ΗΥ.

### Γενικές Ικανότητες

*Λαμβάνοντας υπόψη τις γενικές ικανότητες που πρέπει να έχει αποκτήσει ο πτυχιούχος (όπως αυτές αναγράφονται στο Παράρτημα Διπλώματος και παρατίθενται ακολούθως) σε ποια / ποιες από αυτές αποσκοπεί το μάθημα;*

*Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με τη χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών*

*Προσαρμογή σε νέες καταστάσεις*

*Λήψη αποφάσεων*

*Αυτόνομη εργασία*

*Ομαδική εργασία*

*Εργασία σε διεθνές περιβάλλον*

*Εργασία σε διεπιστημονικό περιβάλλον*

*Παράγωγή νέων ερευνητικών ιδεών*

*Σχεδιασμός και διαχείριση έργων*

*Σεβασμός στη διαφορετικότητα και στην πολυπολιτισμικότητα*

*Σεβασμός στο φυσικό περιβάλλον*

*Επίδειξη κοινωνικής, επαγγελματικής και ηθικής υπευθυνότητας και ευαισθησίας σε θέματα φύλου*

*Άσκηση κριτικής και αυτοκριτικής*

*Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης*

*.....*

*Άλλες...*

*.....*

- Αυτόνομη εργασία
- Άσκηση κριτικής και αυτοκριτικής
- Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης
- Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με τη χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών

### (3) ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

Το μάθημα "Εισαγωγή σε προχωρημένες υπολογιστικές μεθόδους στην επιστήμη των υλικών" εμπεριέχει:

1. Βασικές αρχές και προβλήματα κβαντομηχανικής.  
Εξίσωση του Schrödinger, Τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού, Περιοδικό πηγάδι δυναμικού, Άτομο του Υδρογόνου
2. Εισαγωγή σε εξ' υπαρχής κβαντικούς υπολογισμούς:  
Προσέγγιση Born-Oppenheimer, Προσέγγιση του ενός ηλεκτρονίου, Μέθοδοι Hartree, Hartree-Fock. Θεωρία Συναρτησιακού Πυκνότητας Φορτίου (Density Functional Theory). Επαυξημένου Επίπεδου Κύματος (Augmented Plane Wave)
3. Ημι-υπαρχής υπολογισμούς: Θεωρία Γραμμικός συνδυασμός ατομικών τροχιακών (Linear Combination of Atomic Orbitals- LCAO) Ισχυρής δέσμησης (Tight Binding) και θεωρία Ισχυρής δέσμησης σε προσέγγιση Συναρτησιακού Πυκνότητας Φορτίου (Density Functional Tight Binding).
4. Εφαρμογές σε υπολογισμούς ατομικής και ηλεκτρονικής δομής καθώς και μακροσκοπικών ιδιοτήτων περιοδικών υλικών, βιολογικών μορίων και νανοδιάστατων συστημάτων.

#### (4) ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ και ΜΑΘΗΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ - ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

<p><b>ΤΡΟΠΟΣ ΠΑΡΑΔΟΣΗΣ</b> <i>Πρόσωπο με πρόσωπο, Εξ αποστάσεως εκπαίδευση κ.λπ.</i></p>	<p>Πρόσωπο με πρόσωπο στη τάξη</p>	
<p><b>ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ</b> <i>Χρήση Τ.Π.Ε. στη Διδασκαλία, στην Εργαστηριακή Εκπαίδευση, στην Επικοινωνία με τους φοιτητές</i></p>	<p>Υποστήριξη Μαθησιακής διαδικασίας μέσω της ηλεκτρονικής πλατφόρμας e-course</p>	
<p><b>ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ</b> <i>Περιγράφονται αναλυτικά ο τρόπος και μέθοδοι διδασκαλίας.</i></p> <p><i>Διαλέξεις, Σεμινάρια, Εργαστηριακή Άσκηση, Άσκηση Πεδίου, Μελέτη &amp; ανάλυση βιβλιογραφίας, Φροντιστήριο, Πρακτική (Τοποθέτηση), Κλινική Άσκηση, Καλλιτεχνικό Εργαστήριο, Διαδραστική διδασκαλία, Εκπαιδευτικές επισκέψεις, Εκπόνηση μελέτης (project), Συγγραφή εργασίας / εργασιών, Καλλιτεχνική δημιουργία, κ.λπ.</i></p> <p><i>Αναγράφονται οι ώρες μελέτης του φοιτητή για κάθε μαθησιακή δραστηριότητα καθώς και οι ώρες μη καθοδηγούμενης μελέτης σύμφωνα με τις αρχές του ECTS</i></p>	<p><b>Δραστηριότητα</b></p>	<p><b>Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου</b></p>
	<p>Διαλέξεις</p>	<p>27</p>
	<p>Εργαστηριακή Άσκηση</p>	<p>12</p>
	<p>Μη καθοδηγούμενη μελέτη του φοιτητή και προετοιμασία τελικής εξέτασης μαθήματος ή/και Συγγραφή εργασίας</p>	<p>36</p>
	<p>Σύνολο Μαθήματος</p>	<p>75</p>
<p><b>ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΦΟΙΤΗΤΩΝ</b> <i>Περιγραφή της διαδικασίας αξιολόγησης</i></p> <p><i>Γλώσσα Αξιολόγησης, Μέθοδοι αξιολόγησης, Διαμορφωτική ή Συμπερασματική, Δοκιμασία Πολλαπλής Επιλογής, Ερωτήσεις Σύντομης Απάντησης, Ερωτήσεις Ανάπτυξης Δοκιμίων, Επίλυση Προβλημάτων, Γραπτή Εργασία, Έκθεση / Αναφορά, Προφορική Εξέταση,</i></p>	<p>Γραπτή τελική εξέταση στις κανονικές εξεταστικές περιόδους ή Γραπτή Εργασία και Δημόσια Παρουσίαση ή</p>	

<p>Δημόσια Παρουσίαση, Εργαστηριακή Εργασία, Κλινική Εξέταση Ασθενούς, Καλλιτεχνική Ερμηνεία, Άλλη / Άλλες</p> <p>Αναφέρονται ρητά προσδιορισμένα κριτήρια αξιολόγησης και εάν και που είναι προσβάσιμα από τους φοιτητές.</p>	<p>συνδυασμός γραπτής τελικής εξέτασης και γραπτής εργασίας με δημόσια παρουσίαση</p>
--	---

### (5) ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ-ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

<p>-Προτεινόμενη Βιβλιογραφία :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΦΥΣΙΚΗ ΙΙ, ΑΝΤΩΝΙΟΥ Ν. ΑΝΔΡΙΩΤΗ, ΕΚΔΟΣΕΙΣ ΑΝΙΚΟΥΛΑ, 1999</li> <li>• ΦΥΣΙΚΗ ΣΤΕΡΕΑΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗΣ (Τ. Ι ) (ΜΕΤΑΛΛΑ, ΗΜΙΑΓΩΓΟΙ, ΜΟΝΩΤΕΣ), (Τ. ΙΙ ) (ΤΑΞΗ, ΑΤΑΞΙΑ, ΣΥΣΧΕΤΙΣΕΙΣ) Ε. Ν. ΟΙΚΟΝΟΜΟΥ, ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΕΣ ΕΚΔΟΣΕΙΣ ΚΡΗΤΗΣ, 1997, ΗΡΑΚΛΕΙΟ</li> <li>• Εισαγωγή σε προχωρημένες μέθοδοι υπολογισμοί στην επιστήμη των υλικών, Χ. Λέκκα</li> </ul>
--