

# ΠΥΕ205: ΠΡΟΧΩΡΗΜΕΝΕΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΕΣ ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΥΛΙΚΩΝ

## ΠΕΡΙΓΡΑΦΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

### (1) ΓΕΝΙΚΑ

<b>ΣΧΟΛΗ</b>	ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ		
<b>ΤΜΗΜΑ</b>	Μηχανικών Επιστήμης Υλικών		
<b>ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ</b>	ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΟ – ΠΜΣ «Τεχνολογίες Προηγμένων Υλικών»		
<b>ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ</b>	ΠΥΕ205	<b>ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ</b>	2 <sup>ο</sup>
<b>ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ</b>	Προχωρημένες Υπολογιστικές Τεχνικές Επιστήμης Υλικών		
<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	5	
<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>	Ειδικού υποβάθρου, ανάπτυξης δεξιοτήτων		
<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="https://ecourse.uoi.gr/course/view.php?id=2165">https://ecourse.uoi.gr/course/view.php?id=2165</a>		

## (2) ΜΑΘΗΣΙΑΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

### Μαθησιακά Αποτελέσματα

Περιγράφονται τα μαθησιακά αποτελέσματα του μαθήματος οι συγκεκριμένες γνώσεις, δεξιότητες και ικανότητες κατάλληλου 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:** Κατανόηση των βασικών εννοιών στις σύγχρονες μεθόδους υπολογισμού στα υλικά. Οι διαλέξεις συμπεριλαμβάνουν τις βασικές γνώσεις και θεωρία, ενώ τα εργαστήρια την εφαρμογή των μεθόδων χρησιμοποιώντας τα ανάλογα λογισμικά. Οι τεχνικές διέπουν διάφορες κλίμακες, ξεκινώντας από την ηλεκτρονική με μεθόδους κβαντομηχανικής, την ατομιστική με μεθόδους μοριακής δυναμικής και στοχαστικής ανάλυσης, και του συνεχούς με μεθόδους ανάλυσης των αλληλεπιδράσεων φωτός-ύλης.

**Δεξιότητες:** Υπολογισμός της ενεργειακής δομής ενός κρυστάλλου, των ενεργειακών ιδιοτιμών και ιδιοκαταστάσεων ενός μορίου, οπτικής απορρόφησης ενός μορίου ή ημιαγωγού, δημιουργία ατομιστικών δυναμικών για την αλληλεπίδραση ατόμων σε ένα μόριο, της ακτινικής κατανομής των δεσμών σε ένα στερεό, των ελαστικών σταθερών, την θερμοχωρητικότητα, τους συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης φωτός από μικροδομές και διατάξεις υλικών.

**Ικανότητες:** Κατανόηση των ιδιοτήτων των υλικών μέσω της ανάλυσης των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης, βασικός σχεδιασμός νέων προσομοιώσεων ανάλογα με το ζητούμενο του υπολογισμού, βασικός σχεδιασμός νέων υλικών με επιθυμητές ιδιότητες.

### 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	Σχεδιασμός και διαχείριση έργων
Προσαρμογή σε νέες καταστάσεις	Σεβασμός στη διαφορετικότητα και στην πολυπολιτισμικότητα
Λήψη αποφάσεων	Σεβασμός στο φυσικό περιβάλλον
Αυτόνομη εργασία	Επίδειξη κοινωνικής, επαγγελματικής και ηθικής υπευθυνότητας και ευαισθησίας σε θέματα φύλου
Ομαδική εργασία	Άσκηση κριτικής και αυτοκριτικής
Εργασία σε διεθνές περιβάλλον	Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης
Εργασία σε διεπιστημονικό περιβάλλον	.....
Παράγωγή νέων ερευνητικών ιδεών	Άλλες...
	.....

- Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με τη χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών
- Αυτόνομη εργασία
- Παραγωγή νέων ερευνητικών ιδεών
- Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης

## (3) ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

Εισαγωγή σε κβαντομηχανικούς υπολογισμούς ατομικής και ηλεκτρονιακής δομής, Θεωρίες Born–Oppenheimer, Hartree - Fock

Θεωρίες Density functional Theory, LAPW και Tight Binding

Υπολογισμοί δομικών, ηλεκτρονιακών, οπτικών και μηχανικών ιδιοτήτων των υλικών

Εργαστηριακές ασκήσεις κβαντομηχανικών προσομοιώσεων

Ιεράρχηση υπολογιστικών μεθόδων. Εισαγωγή στην κλασσική ατομιστική προσέγγιση. Βασικά δυναμικά αλληλεπίδρασης για μέταλλα και οργανικά. Περιοδικότητα. Στατικοί υπολογισμοί δομής. Παραμετροποίηση δυναμικών αλληλεπίδρασης.

Προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής. Σύντομη ανασκόπηση κλασσικής μηχανικής, εξισώσεις κίνησης Lagrange και Hamilton. Χώρος φάσεων. Στατιστικά σύνολα, εξίσωση Liouville. Εργοδικότητα. Θεώρημα ισοκατανομής της ενέργειας, θερμοκρασία και πίεση. Αριθμητική επίλυση των εξισώσεων κίνησης. Μέθοδος SHAKE για περιορισμούς. Θερμοστάτες και βαροστάτες.

Προσομοίωση Monte Carlo. Στοχαστικά πειράματα τύπου ευστοχίας-αστοχίας. Κατανομές πιθανότητας τυχαίων αριθμών. Υπολογισμός ολοκληρωμάτων. Αλυσίδες Markov. Δειγματοληψία σπουδαιότητας. Η μέθοδος Metropolis. Προσομοίωση Monte Carlo στο ισόθερμο ισοβαρές στατιστικό σύνολο.

Εργαστηριακή άσκηση: Ιδιότητες μετάλλων από προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής

Εργαστηριακή άσκηση: Ιδιότητες οργανικών μορίων από προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής

Μέθοδος πινάκων μεταφοράς στην διάδοση ακτινοβολίας

Μέθοδος πεπερασμένων διαφορών στην διάδοση ακτινοβολίας σε υλικά και διατάξεις. Μοντέλα απόκρισης υλικών στην ακτινοβολία

Εργαστηριακή άσκηση: φωτονικών υλικών και διατάξεων

#### (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</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>Ηλεκτρονική πλατφόρμα e-course, ασκήσεις σε εργαστήριο υπολογιστών χρησιμοποιώντας υπολογιστικά λογισμικά.</p>													
<p><b>ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ</b> <i>Περιγράφονται αναλυτικά ο τρόπος και μέθοδοι διδασκαλίας.</i>  <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>  <i>Αναγράφονται οι ώρες μελέτης του φοιτητή για κάθε μαθησιακή δραστηριότητα καθώς και οι</i></p>	<p><b>Δραστηριότητα</b></p> <table border="1"> <tr> <td>Διαλέξεις</td> <td>24</td> </tr> <tr> <td>Εργαστήρια</td> <td>15</td> </tr> <tr> <td>Μη καθοδηγούμενη μελέτη, προετοιμασία και τελική εξέταση</td> <td>86</td> </tr> <tr> <td> </td> <td> </td> </tr> <tr> <td> </td> <td> </td> </tr> <tr> <td> </td> <td> </td> </tr> </table>	Διαλέξεις	24	Εργαστήρια	15	Μη καθοδηγούμενη μελέτη, προετοιμασία και τελική εξέταση	86							<p><b>Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου</b></p>
Διαλέξεις	24													
Εργαστήρια	15													
Μη καθοδηγούμενη μελέτη, προετοιμασία και τελική εξέταση	86													

<p>ώρες μη καθοδηγούμενης μελέτης σύμφωνα με τις αρχές του ECTS</p>		
	Σύνολο Μαθήματος	125
<p><b>ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΦΟΙΤΗΤΩΝ</b></p> <p>Περιγραφή της διαδικασίας αξιολόγησης</p> <p>Γλώσσα Αξιολόγησης, Μέθοδοι αξιολόγησης, Διαμορφωτική ή Συμπερασματική, Δοκιμασία Πολλαπλής Επιλογής, Ερωτήσεις Σύντομης Απάντησης, Ερωτήσεις Ανάπτυξης Δοκιμών, Επίλυση Προβλημάτων, Γραπτή Εργασία, Έκθεση / Αναφορά, Προφορική Εξέταση, 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 ατομικών εργασιών.</p>	

#### (5) ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ-ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

<p>ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ-ΜΟΡΙΑΚΕΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ, Α. ΚΟΛΟΚΟΥΡΗΣ, ΕΚΔΟΣΕΣ ΠΑΡΙΣΙΑΝΟΥ, 2021</p> <p>COMPUTATIONAL PHYSICS II, Α. ANDRIOTHS, 1999, ΑΝΙΚΟΥΛΑ PRESS</p> <p>SOLID STATE PHYSICS Ε. Ν. ΟΙΚΟΝΟΜΟΥ, CRETE UNIVERSITY PRESS, 1997, ΗΡΑΚΛΕΙΟ</p>
---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------