

MAS_368 Πληροφορική IV (Εισαγωγή στην Υπολογιστική Επιστήμη των Υλικών)

1. ΓΕΝΙΚΑ

ΣΧΟΛΗ	ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ		
ΤΜΗΜΑ	ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ		
ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΟ		
ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	MAS_368	ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	6 ^ο
ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	Πληροφορική IV		
ΑΥΤΟΤΕΛΕΙΣ ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ		ΕΒΔΟΜΑΔΙΑΙΕΣ ΩΡΕΣ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ	ΠΙΣΤΩΤΙΚΕΣ ΜΟΝΑΔΕΣ
		3	4
ΤΥΠΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	Υποβάθρου		
ΠΡΟΑΠΑΙΤΟΥΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ:	Πληροφορική I, Πληροφορική II		
ΓΛΩΣΣΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ και ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ:	Ελληνικά		
ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ ΠΡΟΣΦΕΡΕΤΑΙ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ERASMUS	Όχι		
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΣΕΛΙΔΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ (URL)	http://www.matersci.upatras.gr/el/courses/		

2. ΜΑΘΗΣΙΑΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Μαθησιακά Αποτελέσματα
<p>Στο τέλος αυτού του μαθήματος ο φοιτητής πρέπει να είναι σε θέση:</p> <p>Να σχεδιάζει και να επιλύει προβλήματα εντοπίζοντας και εφαρμόζοντας κατάλληλες μεθόδους υπολογιστικής επιστήμης των υλικών. Να κατανοεί πλήρως τις δυνατότητες και τους περιορισμούς των υπολογιστικών πειραμάτων και προσομοιώσεων. Για επιλεγμένα προβλήματα, να δημιουργεί υπολογιστικό κώδικα, να επεξεργάζεται τα αποτελέσματα και να ελέγχει την αξιοπιστία τους. Να μπορεί να αναλύσει και να οπτικοποιήσει τα αποτελέσματα των υπολογιστικών πειραμάτων και να συγγράφει τις εργασίες υπό τη μορφή ολοκληρωμένων επιστημονικών αναφορών.</p> <p><i>Το μάθημα σύμφωνα με το Ευρωπαϊκό Πλαίσιο Προσόντων Διά Βίου Μάθησης είναι επιπέδου 6 ως μάθημα πρώτου κύκλου σπουδών.</i></p>
Γενικές Ικανότητες
<p>Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με τη χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών</p> <p>Αυτόνομη εργασία</p> <p>Ομαδική εργασία</p> <p>Παραγωγή νέων ερευνητικών ιδεών</p> <p>Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης.</p>

3. ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

<p>Υπολογισμοί από πρώτες αρχές (ab initio).</p> <p>A. Μόρια. Μοριακή δομή, αρχιτεκτονική και συμμετρία. Συνοπτική παρουσίαση προγραμμάτων Κβαντικής Χημείας, πλεονεκτήματα, μειονεκτήματα και πεδία εφαρμογής. Σχεδιασμός μοριακών δομών και προετοιμασία υπολογισμών με προγράμματα ελεύθερου λογισμικού. Συνήθη είδη υπολογισμών ηλεκτρονικής δομής: Ολική ενέργεια, βελτιστοποίηση γεωμετρίας, συχνότητες ταλάντωσης, διεγερμένες καταστάσεις, επιφάνειες δυναμικής ενέργειας, μοντελοποίηση χημικών αντιδράσεων, θερμοχημεία. Επεξεργασία και ερμηνεία αποτελεσμάτων, ανάλυση πληθυσμών (π.χ. Mulliken, Lowdin, AIM), πυκνότητα καταστάσεων, γραφική αναπαράσταση αποτελεσμάτων με προγράμματα τρισδιάστατων γραφικών, φάσματα UV/Vis, IR, Raman.</p>
--

Β. Περιοδικές δομές (στερεά, επιφάνειες, μονοδιάστατες δομές). Συνοπτική παρουσίαση λογισμικού για υπολογισμούς σε συστήματα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες, πλεονεκτήματα, μειονεκτήματα και πεδία εφαρμογής. Σχεδιασμός συστημάτων με περιοδικές συνοριακές συνθήκες και προετοιμασία υπολογισμών με προγράμματα ελεύθερου λογισμικού. Ψευδοδυναμικά και ανάπτυξη κυματοσυναρτήσεων σε επίπεδα κύματα. Συνήθη είδη υπολογισμών ηλεκτρονικής δομής: Ολική ενέργεια, βελτιστοποίηση γεωμετρίας, βελτιστοποίηση κυψελίδας, υπολογισμός τάσεων και ελαστικών ιδιοτήτων, φωνόνια, δομή ενεργειακών ζωνών και πυκνότητα καταστάσεων για ηλεκτρονικές και για φωνονικές καταστάσεις.

Εισαγωγή στις μοριακές προσομοιώσεις

Διαμοριακά δυναμικά αλληλεπίδρασης και πεδία δυνάμεων (force fields). Η μέθοδος προσομοίωσης της Μοριακής Δυναμικής. Βασικές αρχές και αλγόριθμοί. Θερμοστάτηση και προσομοίωση συστημάτων σε συνθήκες σταθερής θερμοκρασίας. Επεξεργασία αποτελεσμάτων προσομοιώσεων. Κατάστροφη και προσομοίωση επιλεγμένων συστημάτων με Μοριακή Δυναμική. Εισαγωγή στη μέθοδο μοριακής προσομοίωσης Monte Carlo. Εφαρμογές σε πλεγματικά μοντέλα για το μαγνητισμό.

4. ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ και ΜΑΘΗΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ - ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

ΤΡΟΠΟΣ ΠΑΡΑΔΟΣΗΣ	Πρόσωπο με πρόσωπο	
ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ	Η διδασκαλία του μαθήματος γίνεται στο υπολογιστικό κέντρο. Κάθε φοιτητής έχει πρόσβαση σε προσωπικό υπολογιστή και σε χρήση λογισμικού, κατά κανόνα ανοιχτού κώδικα.	
ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ	Δραστηριότητα	Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου
	Διαλέξεις	26
	Εργαστηριακές Ασκήσεις	13
	Συγγραφή Εργασιών	41
	Μελέτη & ανάλυση βιβλιογραφίας	40
	Σύνολο Μαθήματος	120
ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΦΟΙΤΗΤΩΝ	Εργασίες και παρουσιάσεις κατά τη διάρκεια του εξαμήνου. Ο τελικός βαθμός προκύπτει από τις εργαστηριακές εκθέσεις, και από εξέταση κατά τη δημόσια παρουσίαση των εργαστηριακών ασκήσεων που αφορούν υπολογιστική μοντελοποίηση και επίλυση προβλημάτων.	

5. ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- M. P. Allen and D. J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Oxford, 2003.
- P. Harrison, Computational Methods in Physics, Chemistry, and Biology, Wiley, 2001.
- R. LeSar, Introduction to Computational Materials Science: Fundamentals to Applications, CUP, 2013