

1. ΓΕΝΙΚΑ

ΣΧΟΛΗ	ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ		
ΤΜΗΜΑ	ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ		
ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΟ		
ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ		ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	7 ^ο
ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	Υπολογιστική Κβαντική Χημεία		
ΑΥΤΟΤΕΛΕΙΣ ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ		ΕΒΔΟΜΑΔΙΑΙΕΣ ΩΡΕΣ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ	ΠΙΣΤΩΤΙΚΕΣ ΜΟΝΑΔΕΣ
		3	5
ΤΥΠΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	Υποβάθρου		
ΠΡΟΑΠΑΙΤΟΥΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ:	Κβαντομηχανική		
ΓΛΩΣΣΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ και ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ:	Ελληνικά		
ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ ΠΡΟΣΦΕΡΕΤΑΙ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ERASMUS	Ναι (σε μορφή reading course)		
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΣΕΛΙΔΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ (URL)	http://www.matersci.upatras.gr/el/courses/		

2. ΜΑΘΗΣΙΑΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Μαθησιακά Αποτελέσματα

Στο τέλος του μαθήματος ο φοιτητής θα έχει έρθει σε επαφή με τις βασικές μεθόδους ηλεκτρονικής δομής όπως αυτές εφαρμόζονται σε υπολογιστικές μελέτες μορίων, νανοδομών, επιφανειών και στερεών και θα έχει εξοικειωθεί με τη χρήση δημοφιλών υπολογιστικών εργαλείων .

Θα μπορεί να αναγνωρίζει τα πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα των διάφορων μεθόδων/προσεγγίσεων και προγραμμάτων για συνήθη είδη υπολογισμών και θα είναι σε θέση να επιλέξει τις βέλτιστες πρακτικές για την προσομοίωση πλήθους ηλεκτρονικών, οπτικών και δομικών ιδιοτήτων ρεαλιστικών συστημάτων από το χώρο της επιστήμης των υλικών.

Τέλος, θα είναι σε θέση να επεξεργάζεται, να οπτικοποιεί και να παρουσιάζει κατάλληλα τα αποτελέσματα των υπολογισμών.

Το μάθημα σύμφωνα με το Ευρωπαϊκό Πλαίσιο Προσόντων Διά Βίου Μάθησης είναι επιπέδου 6 ως μάθημα πρώτου κύκλου σπουδών.

Γενικές Ικανότητες

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

Αυτόνομη εργασία

Ομαδική εργασία

Παραγωγή νέων ερευνητικών ιδεών

Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης.

3. ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

Εισαγωγή στις μεθόδους Ηλεκτρονικής Δομής της Ύλης. Οι έννοιες της Κβαντικής Χημείας, της Υπολογιστικής Φυσικής Στερεάς Κατάστασης και της Υπολογιστικής Επιστήμης των Υλικών. Κατηγοροποίηση των μεθόδων Υπολογιστικής Επιστήμης των Υλικών και χαρακτηριστικά μεθόδων ευθύ και αναστροφικού χώρου.

A. Μέθοδοι ευθύ χώρου. Η εξίσωση του Schrödinger για πολυηλεκτρονιακά άτομα και μόρια. Η προσέγγιση Hartree-Fock στην περιορισμένη (Restricted) και μη περιορισμένη (Unrestricted) μορφή της. Η προσέγγιση του γραμμικού συνδυασμού ατομικών τροχιακών (LCAO). Η εισαγωγή βάσης στις εξισώσεις Hartree-Fock και οι εξισώσεις Roothan-Hall και Pople-Nesbet. Τα ολοκληρώματα δύο ηλεκτρονίων και ο συνήθης συμβολισμός της κβαντικής χημείας. Το θεώρημα Koopmans και η ανάλυση πληθυσμών κατά Mulliken. Το πρόβλημα του ηλεκτρονιακού συσχετισμού, και οι post-Hartree-Fock μέθοδοι (θεωρία διαταραχών Møller-Plesset, αλληλεπίδραση διαμορφώσεων κ.λ.π). Συναρτήσεις βάσης. Εισαγωγή στη μοριακή συμμετρία, ομάδες σημείου και συμβολισμός Schoenflies.

Η μέθοδος του συναρτησιακού της ηλεκτρονικής πυκνότητας. Τα θεωρήματα Hohenberg-Kohn. Οι εξισώσεις Kohn-Sham. Η ενέργεια ανταλλαγής-συσχετισμού. Προσεγγιστικά συναρτησιακά ανταλλαγής-συσχετισμού. Η προσέγγιση της τοπικής ηλεκτρονιακής πυκνότητας (LDA), η προσέγγιση της γενικευμένης βαθμίδας (GGA). Υβριδικά συναρτησιακά.

Συνοπτική παρουσίαση προγραμμάτων Κβαντικής Χημείας, Σχεδιασμός και προετοιμασία υπολογισμών με προγράμματα ελεύθερου λογισμικού. Υπολογισμοί ολική ενέργειας, βελτιστοποίησης γεωμετρίας, συχνότητες ταλάντωσης, διεγερμένες καταστάσεις, επιφάνειες δυναμικής ενέργειας κ.α.

Β. Μέθοδοι αναστρόφου χώρου. Εξισώσεις Kohn-Sham στο ανάστροφο χώρο. Ο ρόλος της ανταλλαγής και της συσχέτισης. Η έννοια της αυτοσυνέπειας και των υπολογισμών από πρώτες αρχές (ab-initio). Εφαρμογή σε συστήματα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες - όπως στερεά υλικά, κράματα, επιφάνειες, διεπιφάνειες, πολυστρωματικές ενώσεις, ετεροδομές, κράματα - πλεονεκτήματα, μειονεκτήματα και πεδία εφαρμογής. Κατηγοροποίηση των μεθόδων αυτών σε tight-binding, all-electron και ψευδοδυναμικών. Η έννοια της Χαμιλτονιανής μοντέλου στις μεθόδους tight-binding. Ψευδοδυναμικά και ανάπτυξη κυματοσυναρτήσεων σε επίπεδα κύματα. Η έννοια της βάσης στις μεθόδους all-electron και οι μέθοδοι full-potential. Συνήθη είδη υπολογισμών ηλεκτρονικής δομής: Ολική ενέργεια, βελτιστοποίηση γεωμετρίας, βελτιστοποίηση κυψελίδας, δομή ενεργειακών ζωνών και πυκνότητα ηλεκτρονικών καταστάσεων, υπολογισμός τάσεων και ελαστικών ιδιοτήτων, μαγνητισμός, φωνόνια. Προσεγγίσεις για την προσομοίωση της αταξίας, των πλεγματικών ατελειών και των προσμίξεων.

Συνοπτική παρουσίαση προγραμμάτων, σχεδιασμός συστημάτων με περιοδικές συνοριακές συνθήκες και προετοιμασία υπολογισμών με προγράμματα ελεύθερου λογισμικού. Υπολογισμοί, προσομοιώσεις και οπτικοποίηση αποτελεσμάτων.

4. ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ και ΜΑΘΗΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ - ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

ΤΡΟΠΟΣ ΠΑΡΑΔΟΣΗΣ	Πρόσωπο με πρόσωπο		
ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ	Η διδασκαλία του μαθήματος γίνεται τόσο σε αίθουσα όσο και στο υπολογιστικό κέντρο όπου ο κάθε φοιτητής έχει πρόσβαση σε προσωπικό υπολογιστή και σε χρήση λογισμικού, κατά κανόνα ανοιχτού κώδικα.		
ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ		<i>Δραστηριότητα</i>	<i>Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου</i>
		Διαλέξεις	26
		Εργαστηριακές Ασκήσεις	13
		Συγγραφή Εργασιών	46
		Μελέτη & ανάλυση βιβλιογραφίας	40
		<i>Σύνολο Μαθήματος</i>	<i>125</i>
ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΦΟΙΤΗΤΩΝ	Εργασίες και παρουσιάσεις κατά τη διάρκεια του εξαμήνου ή/και προφορική τελική εξέταση. 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 ή/και από την τελική προφορική εξέταση.		

5. ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- Wolfram Koch, Max C. Holthausen, A Chemist's Guide to Density Functional Theory, Wiley-VCH 2001
- Frank Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley 2007.

- J. B. Foresman and A. Frisch, 3rd ed., Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, 2015.
- Walter Harrison, Electronic Structure and the Properties of Solids, Dover, 1989.
- K. Ohno, K. Esfarjani, Y. Kawazoe, Computational Materials Science: From Ab Initio to Monte Carlo Methods, Springer, 1999.
- Eftimios Kaxiras, Atomic and Electronic Structure of Solids, Cambridge University Press, 2003.
- Richard Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods, Cambridge University Press, 2004.
- Jorge Kohanoff, Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules, Cambridge University Press, 2006.