ΠΕΡΙΓΡΑΜΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

(1) ΓΕΝΙΚΑ

ΣΧΟΛΗ	ΘΕΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ		
ΤΜΗΜΑ	ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΥΛΙΚΩΝ		
ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΟ		
ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	ΕΜΥ-415	**ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ**	
ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΥΛΙΚΩΝ Ι		
ΑΥΤΟΤΕΛΕΙΣ ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ *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*		**ΕΒΔΟΜΑΔΙΑΙΕΣ ΩΡΕΣ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ**	**ΠΙΣΤΩΤΙΚΕΣ ΜΟΝΑΔΕΣ**
Διαλέξεις		2	
Εργαστηριακές Ασκήσεις		3	
Προσθέστε σειρές αν χρειαστεί. Η οργάνωση διδασκαλίας και οι διδακτικές μέθοδοι που χρησιμοποιούνται περιγράφονται αναλυτικά στο (δ).		5	5
ΤΥΠΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ *γενικού υποβάθρου, ειδικού υποβάθρου, ειδίκευσης γενικών γνώσεων, ανάπτυξης δεξιοτήτων*	ΕΙΔΙΚΟΥ ΥΠΟΒΑΘΡΟΥ, ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ ΔΕΞΙΟΤΗΤΩΝ, ΕΙΔΙΚΕΥΣΗΣ ΓΕΝΙΚΩΝ ΓΝΩΣΕΩΝ		
ΠΡΟΑΠΑΙΤΟΥΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ:	ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΟΝ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΙΣΜΟ Η/Υ (ΕΜΥ-113)		
ΓΛΩΣΣΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ και ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ:	ΕΛΛΗΝΙΚΑ		
ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ ΠΡΟΣΦΕΡΕΤΑΙ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ERASMUS	ΝΑΙ		
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΣΕΛΙΔΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ (URL)	http://www.materials.uoc.gr/el/undergrad/courses/EMY415/		

(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*

Οι φοιτητές με το πέρας του μαθήματος αναμένεται να:

1. *Γνωρίσουν τις βασικές τεχνικές που χρησιμοποιούνται στη θεωρητική μελέτη των υλικών με χρήση ηλεκτρονικού υπολογιστή.*
2. *Εξοικειωθούν με τις κατάλληλες μεθόδους μοντελοποίησης και προσομοίωσης για την κατανόηση της σχέσης δομής-ιδιοτήτων των υλικών καθώς και διεργασιών σε διάφορα προβλήματα της επιστήμης υλικών.*
3. *Αποκτήσουν θεμελιώδες υπόβαθρο στον σύγχρονο προγραμματισμό, μοντελοποίηση και προσομοίωση των υλικών.*
4. *Αναπτύξουν τεχνικές δεξιότητες σε επιστημονικούς υπολογισμούς και λογισμικό.*
5. *Αποκτήσουν πρακτική εμπειρία στην μοντελοποίηση περίπλοκων φαινομένων και στην επίλυση σύνθετων προβλημάτων στην επιστήμη υλικών.*

Το μάθημα σύμφωνα με το Ευρωπαϊκό Πλαίσιο Προσόντων Δια Βίου Μάθησης είναι επιπέδου 6 ως προχωρημένο

μάθημα πρώτου κύκλου σπουδών και 7 ως μάθημα δεύτερου κύκλου σπουδών.

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…*
	…….

- Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης
- Αυτόνομη εργασία
- Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με τη χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών
- Σχεδιασμός και διαχείριση έργων

(3) ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

1. Εισαγωγή στα μοντέλα υπολογιστικής προσομοίωσης των υλικών
   Χωρική και χρονική ιεράρχηση δομής και διεργασιών των υλικών και σύντομη περιγραφή αντίστοιχων μοντέλων (κβαντομηχανικών, ατομιστικών, μεσοσκοπικών, συνεχούς).
2. Θεμελιώδεις γνώσεις για κλασικές προσομοιώσεις
   Σύντομη επισκόπηση στοιχείων κλασικής μηχανικής, στατιστικής φυσικής, αριθμητικών μεθόδων ολοκλήρωσης και επίλυσης διαφορικών εξισώσεων.
3. Προσομοιώσεις σε ατομικό επίπεδο
   Δυναμικά δια-ατομικής αλληλεπίδρασης. Μέθοδος μοριακής δυναμικής. Μέθοδος Monte Carlo. Αρχικές συνθήκες, δημιουργία κρυσταλλικών πλεγμάτων, ατέλειες. Συνοριακές συνθήκες. Μέθοδοι διατήρησης σταθερής θερμοκρασίας ή/και πίεσης.
4. Ανάλυση αποτελεσμάτων
   Ιδιότητες ισορροπίας, δομικές, μηχανικές, δυναμικές ιδιότητες. Υπολογισμοί ιδιοτήτων συγκεκριμένων υλικών με ρεαλιστικά δυναμικά αλληλεπίδρασης και σύγκριση με πειραματικές τιμές.
5. Εισαγωγή στους υπολογισμούς από πρώτες αρχές
   Τα βασικά στοιχεία της θεωρίας συναρτησιακού πυκνότητας. Υπολογισμοί δομικών και ελαστικών ιδιοτήτων.
6. Προσομοιώσεις σε μεσοσκοπικό επίπεδο και στο συνεχές
   Μέθοδοι αδρών κόκκων. Διακριτοποίηση συνεχούς χώρου. Μέθοδοι πεπερασμένων διαφορών και στοιχείων. Εφαρμογές (π.χ., δυναμική εξαρθρώσεων, διάδοση ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων). Κυτταρικά αυτόματα.
7. Συνδυασμοί μεθόδων
   Ταυτόχρονος και ιεραρχημένος συνδυασμός μοντέλων. Προσομοιώσεις πολλαπλής κλίμακας.

(4) ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ και ΜΑΘΗΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ - ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

<table>
<tr><td>ΤΡΟΠΟΣ ΠΑΡΑΔΟΣΗΣ
Πρόσωπο με πρόσωπο, Εξ αποστάσεως εκπαίδευση κ.λπ.</td><td>Πρόσωπο με πρόσωπο</td></tr>
<tr><td>ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ
Χρήση Τ.Π.Ε. στη Διδασκαλία, στην Εργαστηριακή Εκπαίδευση, στην Επικοινωνία με τους φοιτητές</td><td>Προγραμματισμός και χρήση εξειδικευμένου λογισμικού σε ηλεκτρονικούς υπολογιστές στα πλαίσια της εργαστηριακής εκπαίδευσης, χρήση Τ.Π.Ε. στην επικοινωνία με τους φοιτητές, παρουσίαση διαφανειών, χρήση ψηφιακού υλικού για περαιτέρω κατανόηση της διδαχθείσας ύλης.</td></tr>
<tr><td>ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ
Περιγράφονται αναλυτικά ο τρόπος και μέθοδοι διδασκαλίας.
Διαλέξεις, Σεμινάρια, Εργαστηριακή Άσκηση, Άσκηση Πεδίου, Μελέτη & ανάλυση βιβλιογραφίας, Φροντιστήριο, Πρακτική (Τοποθέτηση), Κλινική Άσκηση, Καλλιτεχνικό Εργαστήριο, Διαδραστική διδασκαλία, Εκπαιδευτικές επισκέψεις, Εκπόνηση μελέτης (project), Συγγραφή εργασίας / εργασιών, Καλλιτεχνική δημιουργία, κ.λπ.

Αναγράφονται οι ώρες μελέτης του φοιτητή για κάθε μαθησιακή δραστηριότητα καθώς και οι ώρες μη καθοδηγούμενης μελέτης σύμφωνα με τις αρχές του ECTS</td><td>
<table>
<tr><th>Δραστηριότητα</th><th>Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου</th></tr>
<tr><td>Διαλέξεις</td><td>26</td></tr>
<tr><td>Εργαστήριο</td><td>39</td></tr>
<tr><td>Μελέτη</td><td>75</td></tr>
<tr><td></td><td></td></tr>
<tr><td></td><td></td></tr>
<tr><td></td><td></td></tr>
<tr><td></td><td></td></tr>
<tr><td></td><td></td></tr>
<tr><td></td><td></td></tr>
<tr><td>Σύνολο Μαθήματος</td><td>140</td></tr>
</table>
</td></tr>
<tr><td>ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΦΟΙΤΗΤΩΝ
Περιγραφή της διαδικασίας αξιολόγησης

Γλώσσα Αξιολόγησης, Μέθοδοι αξιολόγησης, Διαμορφωτική ή Συμπερασματική, Δοκιμασία Πολλαπλής Επιλογής, Ερωτήσεις Σύντομης Απάντησης, Ερωτήσεις Ανάπτυξης Δοκιμίων, Επίλυση Προβλημάτων, Γραπτή Εργασία, Έκθεση / Αναφορά, Προφορική Εξέταση, Δημόσια Παρουσίαση, Εργαστηριακή Εργασία, Κλινική Εξέταση Ασθενούς, Καλλιτεχνική Ερμηνεία, Άλλη / Άλλες

Αναφέρονται ρητά προσδιορισμένα κριτήρια αξιολόγησης και εάν και που είναι προσβάσιμα από τους φοιτητές.</td><td>Η αξιολόγηση των φοιτητών γίνεται με υποχρεωτικές ασκήσεις που παραδίδονται και διορθώνονται κατά την διάρκεια του εξαμήνου και με τελική εργασία και την παρουσίασή της στην τάξη στο τέλος του εξαμήνου.</td></tr>
</table>

(5) ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ-ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Προτεινόμενη Βιβλιογραφία:

- Α.Ν. Ανδριώτης, Υπολογιστική Φυσική, 2η Έκδοση, Εκδόσεις Ανικούλα, Αθήνα (2016).
- J.M. Thijssen, Computational Physics, Cambridge University Press, Cambridge, New York (1999).
- D. Raabe, Computational Materials Science: the Simulation of Materials Microstructures and Properties, Wiley-VCH, Weinheim, New York (1998).
- M. P. Allen, D.J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Clarendon Press, Oxford (1990).
- D. Frenkel, B. Smit, Understanding Molecular Simulation: from Algorithms to Applications, Academic Press, San Diego, (1996).
- K. Ohno, K. Esfarjani, and Y. Kawazoe, Introduction to Computational Materials Science: from Ab Initio to Monte Carlo Methods, Springer-Verlag, Berlin, New York (1999).
- K. Binder, D.W. Heermann, Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: an Introduction, Springer, Berlin, New York (1997).
- K. Binder, Monte Carlo and Molecular Dynamics Simulations in Polymer Sciences, Oxford University Press, Oxford, New York (1995).
- D.C. Rapaport, The art of Molecular Dynamics Simulation, Cambridge University Press, Cambridge, New York (2004, 1998).
- T. Saito, Computational Materials Design, Springer, Berlin, New York (1999).

COURSE OUTLINE

(1) GENERAL

SCHOOL	SCIENCES AND ENGINEERING		
ACADEMIC UNIT	MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING		
LEVEL OF STUDIES	UNDERGRADUATE		
COURSE CODE	EMY-415	**SEMESTER**	
COURSE TITLE	COMPUTATIONAL MATERIALS SCIENCE I		
INDEPENDENT TEACHING ACTIVITIES *if credits are awarded for separate components of the course, e.g. lectures, laboratory exercises, etc. If the credits are awarded for the whole of the course, give the weekly teaching hours and the total credits*		**WEEKLY TEACHING HOURS**	**CREDITS**
Lectures		3	
Office hours		2	
Add rows if necessary. The organisation of teaching and the teaching methods used are described in detail at (d).		5	5
COURSE TYPE *general background, special background, specialised general knowledge, skills development*	SPECIAL BACKGROUND, SKILLS DEVELOPMENT, SPECIALIZED GENERAL KNOWLEDGE		
PREREQUISITE COURSES:	INTRODUCTION TO COMPUTER PROGRAMMING (EMY-113)		
LANGUAGE OF INSTRUCTION and EXAMINATIONS:	GREEK		
IS THE COURSE OFFERED TO ERASMUS STUDENTS	YES		
COURSE WEBSITE (URL)	https://qtm.materials.uoc.gr/courses/yey/		

(2) LEARNING OUTCOMES

Learning outcomes

The course learning outcomes, specific knowledge, skills and competences of an appropriate level, which the students will acquire with the successful completion of the course are described.

Consult Appendix A

- *Description of the level of learning outcomes for each qualifications cycle, according to the Qualifications Framework of the European Higher Education Area*
- *Descriptors for Levels 6, 7 & 8 of the European Qualifications Framework for Lifelong Learning and Appendix B*
- *Guidelines for writing Learning Outcomes*

By the end of the course, students are expected to:

1. Know the basic techniques used for the theoretical study of materials using computers.
2. Become familiar with appropriate modeling and simulation methods for understanding the materials structure-properties relationship as well as the processes involved in several materials science problems.
3. Acquire a fundamental background in state-of-the-art programming, modelling and simulation of materials.
4. Develop scientific computing and software related technical skills.
5. Acquire hands-on experience in modeling complex phenomena and in solving challenging problems in materials science.

The course according to the European Qualifications Framework for Lifelong Learning belongs to level 6 as an advanced first cycle course and to level 7.

General Competences

Taking into consideration the general competences that the degree-holder must acquire (as these appear in the Diploma Supplement and appear below), at which of the following does the course aim?

Search for, analysis and synthesis of data and information, with the use of the necessary technology	*Project planning and management*
Adapting to new situations	*Respect for difference and multiculturalism*
Decision-making	*Respect for the natural environment*
	Showing social, professional and ethical responsibility and sensitivity to gender

Working independently	*issues*
Team work	*Criticism and self-criticism*
Working in an international environment	*Production of free, creative and inductive thinking*
Working in an interdisciplinary environment	*……*
Production of new research ideas	*Others…*
	…….

- Production of free, creative and inductive thinking
- Working independently
- Search for, analysis and synthesis of data and information, with the use of the necessary technology
- Project planning and management

(3) SYLLABUS

1. Introduction to materials models for computer simulations
Length and time scales hierarchy in modeling materials structure and processes (quantum mechanical, atomistic, mesoscopic, continuum).

2. Fundamental background for classical simulations
Brief review of classical mechanics, statistical physics, methods of numerical integration and solution of differential equations.

3. Atomic-level simulations
Interatomic interaction potentials. Molecular dynamics method. Monte Carlo method. Initial conditions, crystal lattice construction, defects. Boundary conditions. Methods for constant temperature or/and pressure simulations.

4. Results analysis
Equilibrium properties, structural, mechanical, dynamical properties. Specific materials properties calculation with realistic interaction potentials and comparison with experiments.

5. Introduction to first principles calculations
The basics of density functional theory. Structural and elastic properties calculations.

6. Mesoscopic and continuum simulations
Coarse-grain method. Space discretization. Finite difference and finite element methods. Applications (e.g., dislocation dynamics, electromagnetic wave propagation). Cellular automata.

7. Combining methods
Concurrent and hierarchical combination of models. Multiple scale simulations.

(4) TEACHING and LEARNING METHODS - EVALUATION

DELIVERY *Face-to-face, Distance learning, etc.*	Face-to-face
USE OF INFORMATION AND COMMUNICATIONS TECHNOLOGY *Use of ICT in teaching, laboratory education, communication with students*	Computer programming and use of specialized software in laboratory education, use of ICT in communication with students, lecture presentations, use of digital resources for further understanding taught material.
TEACHING METHODS *The manner and methods of teaching are described in detail.* *Lectures, seminars, laboratory practice, fieldwork, study and analysis of bibliography, tutorials, placements, clinical practice, art workshop, interactive teaching, educational visits, project, essay writing, artistic creativity, etc.* *The student's study hours for each learning activity are given as well as the hours of non-*	

Activity	*Semester workload*
Lectures	26
Laboratory work	39
Study hours	75

directed study according to the principles of the ECTS		
	Course total	**140**
STUDENT PERFORMANCE EVALUATION *Description of the evaluation procedure* *Language of evaluation, methods of evaluation, summative or conclusive, multiple choice questionnaires, short-answer questions, open-ended questions, problem solving, written work, essay/report, oral examination, public presentation, laboratory work, clinical examination of patient, art interpretation, other* *Specifically-defined evaluation criteria are given, and if and where they are accessible to students.*	Student performance evaluation consists of mandatory exercises handed out and graded during the course of the semester and a final project with a class presentation at the end of the semester.	

(5) ATTACHED BIBLIOGRAPHY

- *Suggested bibliography:*

- A.N. Andriotis, Computational Physics, 2nd Edition, Anikoula Editions, Athens (2016).
- J.M. Thijssen, Computational Physics, Cambridge University Press, Cambridge, New York (1999).
- D. Raabe, Computational Materials Science: the Simulation of Materials Microstructures and Properties, Wiley-VCH, Weinheim, New York (1998).
- M. P. Allen, D.J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Clarendon Press, Oxford (1990).
- D. Frenkel, B. Smit, Understanding Molecular Simulation: from Algorithms to Applications, Academic Press, San Diego, (1996).
- K. Ohno, K. Esfarjani, and Y. Kawazoe, Introduction to Computational Materials Science: from Ab Initio to Monte Carlo Methods, Springer-Verlag, Berlin, New York (1999).
- K. Binder, D.W. Heermann, Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: an Introduction, Springer, Berlin, New York (1997).
- K. Binder, Monte Carlo and Molecular Dynamics Simulations in Polymer Sciences, Oxford University Press, Oxford, New York (1995).
- D.C. Rapaport, The art of Molecular Dynamics Simulation, Cambridge University Press, Cambridge, New York (2004, 1998).