ΠΕΡΙΓΡΑΜΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

(1) ΓΕΝΙΚΑ

ΣΧΟΛΗ	ΘΕΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ		
ΤΜΗΜΑ	ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΥΛΙΚΩΝ		
ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΟ		
ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	ΕΜΥ-416	**ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ**	6ο
ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΥΛΙΚΩΝ ΙΙ: ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ		

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:	Εισαγωγή στον προγραμματισμό 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/EMY416/

(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. Εξοικειωθούν με τη σύγχρονη θεωρία ηλεκτρονικής δομής και ειδικότερα με τη θεωρία DFT (Density Functional Theory), μέσα από τη χρήση μεγάλων υπολογιστικών πακέτων.
2. Γνωρίζουν την θεωρία για την επίλυση κβαντομηχανικών προβλημάτων στην επιστήμη υλικών και πώς να εκτελέσουν υπολογιστικά πειράματα για μελέτη ιδιοτήτων προτύπων υλικών.
3. Αναπτύξουν τεχνικές δεξιότητες σε επιστημονικούς υπολογισμούς και λογισμικό.
4. Αποκτήσουν πρακτική εμπειρία στους υπολογισμούς από πρώτες αρχές για την επίλυση σύνθετων προβλημάτων στην επιστήμη υλικών.

Το μάθημα σύμφωνα με το Ευρωπαϊκό Πλαίσιο Προσόντων Δια Βίου Μάθησης είναι ταυτόχρονα 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 στην θεωρία DFT.
Η εξίσωση Schrödinger για πολυηλεκτρονιακά συστήματα, και τρόποι επίλυσής της. Το δυναμικό ανταλλαγής και συσχέτισης. Υπολογισμός της ενέργειας μορίων και της ενθαλπίας αντιδράσεων.

2. Κρυσταλλικά στερεά.
Υπολογισμός της πυκνότητας και του μέτρου ελαστικότητας με χρήση του θεωρήματος Bloch. Ενεργειακές ζώνες.

3. Επιφάνειες.
Επέκταση της θεωρίας σε ημιπεριοδικές δομές. Η έννοια της επιφανειακής τάσης. Πώς επηρεάζεται η επιφάνεια και η ιδιότητές της από προσροφημένα μόρια. Ενθαλπία προσρόφησης.

4. Μαγνητικά υλικά.
Ο ρόλος του σπιν στις ιδιότητες μαγνητικών υλικών, όπως ο σίδηρος, αλλά και στη συνοχή μή μαγνητικών μορίων, όπως το H_2O. Η έννοια της πυκνότητας καταστάσεων και πώς αυτή υπολογίζεται. Ταλαντώσεις απλών μορίων.

5. Πειραματικές τεχνικές.
Βασικές αρχές πειραμάτων απεικόνισης της ηλεκτρονικής δομής, όπως STM (Scanning Tunneling Microscope), και προσομοίωσή τους. Υπολογισμοί δομής ηλεκτρονικών ζωνών σε μέταλλα, μονωτές και ημιαγωγούς.

6. Ταχύτητες αντιδράσεων.
Η μέθοδος TST (Transition State Theory) και η προσέγγιση της ελαστικής ταινίας για τον υπολογισμό της ταχύτητας μιας χημικής αντίδρασης. Εφαρμογή στον υπολογισμό σταθερών διάχυσης.

(4) ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ και ΜΑΘΗΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ - ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

ΤΡΟΠΟΣ ΠΑΡΑΔΟΣΗΣ *Πρόσωπο με πρόσωπο, Εξ αποστάσεως εκπαίδευση κ.λπ.*	Πρόσωπο με πρόσωπο
ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ *Χρήση Τ.Π.Ε. στη Διδασκαλία, στην Εργαστηριακή Εκπαίδευση, στην Επικοινωνία με τους φοιτητές*	Προγραμματισμός και εκτεταμένη 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.
ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ *Περιγράφονται αναλυτικά ο τρόπος και μέθοδοι διδασκαλίας.* *Διαλέξεις, Σεμινάρια, Εργαστηριακή Άσκηση, Άσκηση Πεδίου, Μελέτη & ανάλυση*	

Δραστηριότητα	***Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου***
Διαλέξεις	26
Εργαστήριο	39

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*	Μελέτη: 75 Σύνολο Μαθήματος: **140**
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.*	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.

(5) ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ-ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Προτεινόμενη Βιβλιογραφία:

- Αντωνίου Ν. Ανδριώτη, Υπολογιστική Φυσική, τόμος ΙΙ, 1999.
- Frank Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley-VCH, 2nd edition 2006.
- Efthimios Kaxiras, Atomic and Electronic Structure of Solids, Cambridge University Press, 2003.
- Richard M. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods, Cambridge University Press, 2004.
- Jos M. Thijssen, Computational Physics, Cambridge University Press, 1999.

COURSE OUTLINE

(1) GENERAL

SCHOOL	SCIENCES AND ENGINEERING		
ACADEMIC UNIT	MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING		
LEVEL OF STUDIES	UNDERGRADUATE		
COURSE CODE	EMY-416	**SEMESTER**	
COURSE TITLE	COMPUTATIONAL MATERIALS SCIENCE II: ELECTRONIC STRUCTURE		
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:	EMY-113		
LANGUAGE OF INSTRUCTION and EXAMINATIONS:	GREEK		
IS THE COURSE OFFERED TO ERASMUS STUDENTS	YES		
COURSE WEBSITE (URL)	http://www.materials.uoc.gr/el/undergrad/courses/EMY416/		

(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. Become familiar with the modern theory of electronic structure, and more specifically with DFT (Density Functional Theory), by employing large software packages.
2. Know the basic principles of solving quantum mechanical problems in materials science as well as how to perform computational experiments in order to study properties of standard materials.
3. Develop scientific computing and software related technical skills.
4. Acquire hands-on experience in first principles calculations for 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 as a second cycle course.

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*
Working independently	*Showing social, professional and ethical responsibility and sensitivity to gender issues*

Team work *Working in an international environment* *Working in an interdisciplinary environment* *Production of new research ideas*	*Criticism and self-criticism* *Production of free, creative and inductive thinking* *……* *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 DFT.
Schrödinger equation for polyelectronic systems and methods for its solution. Exchange and correlation potential. Calculation of molecules energy and reactions enthalpy.

2. Crystalline solids.
Density and bulk modulus calculation using Bloch theorem. Energy bands.

3. Surfaces.
Extension of theory to semi-periodic structures. The concept of surface tension. Influence of adsorbed molecules on surface properties. Adsorption enthalpy.

4. Magnetic materials. The role of spin in the magnetic properties of materials, such as iron, as well as in the cohesion of nonmagnetic molecules, such as H_2O. The concept of density of states and its calculation. Oscillations of simple molecules.

5. Experimental techniques.
Basic principles of experiments for the depiction of the electronic structure, such as STM (Scanning Tunneling Microscope) and their simulation. Electronic band structure calculations in metals, insulators, and semiconductors.

6. Reaction speeds.
TST (Transition State Theory) and nudged elastic band method for the calculation of the speed of a chemical reaction. Application to diffusion constants calculation.

(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 extensive use of specialized software in laboratory education, use of ICT in communication with students, 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-directed study according to the principles of the ECTS*	
STUDENT PERFORMANCE EVALUATION *Description of the evaluation procedure*	Student performance evaluation consists of mandatory exercises handed out and graded during the course of the semester and a final project with in class presentation at the end of the semester.

Activity	***Semester workload***
Lectures	26
Laboratory work	39
Study hours	75
Course total	**140**

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.*	

(5) ATTACHED BIBLIOGRAPHY

- *Suggested bibliography:*

- Antonios N. Andriotis, Computational Physics, Volume II, 1999.
- Frank Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley-VCH, 2nd edition 2006.
- Efthimios Kaxiras, Atomic and Electronic Structure of Solids, Cambridge University Press, 2003.
- Richard M. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods, Cambridge University Press, 2004.
- Jos M. Thijssen, Computational Physics, Cambridge University Press, 1999.