ΠΕΡΙΓΡΑΜΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΥΛΙΚΩΝ

(1) ΓΕΝΙΚΑ

ΣΧΟΛΗ	ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ		
ΤΜΗΜΑ	ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ		
ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΟ		
ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ		**ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ**	**9ο**
ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	**ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΥΛΙΚΩΝ**		

ΑΥΤΟΤΕΛΕΙΣ ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ	**ΕΒΔΟΜΑΔΙΑΙΕΣ ΩΡΕΣ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ**	**ΠΙΣΤΩΤΙΚΕΣ ΜΟΝΑΔΕΣ**
Διαλέξεις	4	5

ΤΥΠΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ *γενικού υποβάθρου, ειδικού υποβάθρου, ειδίκευσης γενικών γνώσεων, ανάπτυξης δεξιοτήτων*	Ειδικού υποβάθρου
ΠΡΟΑΠΑΙΤΟΥΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ:	ΟΧΙ
ΓΛΩΣΣΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ και ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ:	ΕΛΛΗΝΙΚΉ
ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ ΠΡΟΣΦΕΡΕΤΑΙ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ERASMUS	ΝΑΙ
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΣΕΛΙΔΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ (URL)	

(2) ΜΑΘΗΣΙΑΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Μαθησιακά Αποτελέσματα

Οι φοιτητές αναμένεται ότι στα πλαίσια του μαθήματος θα αποκτήσουν

- γνώση στο υπόβαθρο που σχετίζεται με τις μοριακές προσομοιώσεις υλικών σε διαφορετικές χωρικές και χρονικές κλίμακες,
- εξοικείωση με κατάλληλες υπολογιστικές μεθόδους για την αντιμετώπιση διαφορετικών προβλημάτων που σχετίζονται με την μελέτη ιδιοτήτων υλικών,
- κατανόηση των προσεγγίσεων που υπεισέρχονται στους υπολογισμούς και των ορίων της κάθε τεχνικής,
- ανάπτυξη της ικανότητας ερμηνείας των αποτελεσμάτων και συσχέτισης αυτών με αντίστοιχα πειραματικά αποτελέσματα.

Γενικές Ικανότητες

- Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με τη χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών
- Προσαρμογή σε νέες καταστάσεις
- Αυτόνομη εργασία
- Ομαδική εργασία
- Εργασία σε διεθνές περιβάλλον
- Παραγωγή νέων ερευνητικών ιδεών
- Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης

(3) ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

1. Στοιχεία Στατιστικής Θερμοδυναμικής Πιθανότητες: Συνάρτηση επιμερισμού, Από τις πιθανότητες στην θερμοδυναμική

2. Προσομοιώσεις και Στατιστική Θερμοδυναμική: Μέθοδος Monte Carlo, Μέθοδος μοριακής δυναμικής, Μέθοδος στοχαστικής δυναμικής
3. Υπολογισμός Δομικών και Θερμοδυναμικών Ιδιοτήτων Υλικών: Συνάρτηση ακτινικής κατανομής και στατικός παράγοντας δομής, Δυναμικός παράγοντας δομής, Πυκνότητα και συμπιεστότητα, Συντελεστής διάχυσης, Διαγράμματα φάσεων
4. Συσχέτιση με Πειραματικά Μετρούμενες Ποσότητες: Σκέδαση ακτίνων-Χ και νετρονίων, Μη-ελαστική σκέδαση νετρονίων, Φασματοσκοπία NMR, Διηλεκτρική φασματοσκοπία

ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ και ΜΑΘΗΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ - ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

ΤΡΟΠΟΣ ΠΑΡΑΔΟΣΗΣ	Πρόσωπο με πρόσωπο
ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ	• Παρουσιάσεις power point σε Η/Υ • Ηλεκτρονική τάξη
ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ	

Δραστηριότητα	***Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου***
Διαλέξεις	60
Συγγραφή εργασίας / εργασιών	25
Εκπόνηση μελέτης	40
Σύνολο Μαθήματος	***125***

ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΦΟΙΤΗΤΩΝ	Γλώσσα αξιολόγησης είναι η Ελληνική. Η αξιολόγηση περιλαμβάνει επίλυση προβλημάτων και ερωτήσεις σύντομης απάντησης Γραπτή Εξέταση (60%) Γραπτή εργασία(20%) Εκπόνηση μελέτης (20%)

(4) ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ-ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- Προτεινόμενη Βιβλιογραφία:

- ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΦΥΣΙΚΗ ΚΑΙ ΘΕΡΜΟΔΥΝΑΜΙΚΗ, Έκδοση: 2η/2002, ΟΙΚΟΝΟΜΟΥ Ε.Ν., ISBN: 960-7309-76-6.
- ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΘΕΡΜΟΔΥΝΑΜΙΚΗ, Έκδοση: 003/1993, Γ. ΠΑΠΑΝΑΣΤΑΣΙΟΥ-Π. ΝΙΚΗΤΑΣ, ISBN: 960-317-003-8, (Εκδότης): Όλγα Σιμώνη
- D. Raabe, “Computational Materials Science: The Simulation of Materials Microstructures and Properties”, John Wiley & Sons, Weinheim, Germany (1998)
- D. Frenkel and B. Smit “Understanding Molecular Simulation : from Algorithms to Applications”, Academic Press, San Diego (2002)