

Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών

ΕΙΔΙΚΑ ΚΕΦΑΛΑΙΑ ΣΤΗΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΥΛΙΚΩΝ (ΕΤΥ 448)

Εργαστήριο Ηλεκτρονικής Δομής

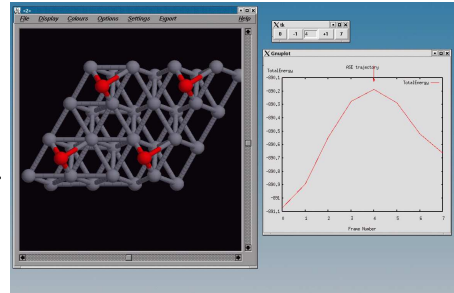
Διδάσκοντες: Ι. Ρεμεδιάκης και Γ. Κοπιδάκης

Επίπεδο: 4ου έτους και μεταπτυχιακό. **ΔΜ:** 3.

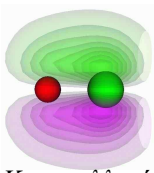
Προαπαιτούμενα: Φυσική Στερεάς Κατάστασης: Εισαγωγή (305) και Ηλεκτρονικοί Υπολογιστές 2 (213).

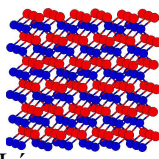
Βαθμολογία: Από αναφορές (50%) και εργασία (30% κείμενο, 20% παρουσίαση). Το πολύ μία απουσία.

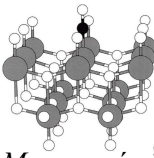
Σκοπός: Εξοικίωση με τη σύγχρονη θεωρία ηλεκτρονικής δομής, και ειδικότερα με τη θεωρία DFT (Density Functional Theory), μέσα από τη χρήση μεγάλων υπολογιστικών πακέτων. Υπολογιστικά πειράματα για μελέτη ιδιοτήτων προτύπων υλικών.

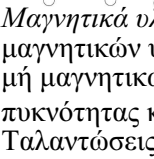


Αναλυτική περιγραφή:

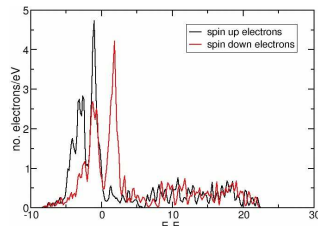
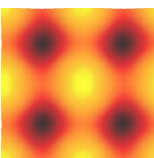
- 

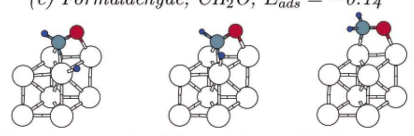
1. Εισαγωγή στην θεωρία DFT. Η εξίσωση Schrödinger για πολυηλεκτρονικά συστήματα, και τρόποι επίλυσής της. Το δυναμικό ανταλλαγής και συσχέτισης. Το πρόγραμμα daccaro. Υπολογισμός της ενέργειας μορίων και της ενθαλπίας αντιδράσεων.
- 

2. Κρυσταλλικά στερεά. Υπολογισμός της πυκνότητας και του μέτρου ελαστικότητας με χρήση του θεωρήματος Bloch και ανάπτυγμα της κυματοσυνάρτησης σε επίπεδα κύματα. 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 H₂O. 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.

(c) Formaldehyde, CH₂O; $E_{ads} = -0.14$

HCO*+H* (-1.13) TS (-0.34) CH₂O* (-0.73)
- 7. Άλλα θέματα.** Εφόσον υπάρχει χρόνος, θα καλυφθούν και άλλα θέματα της σύγχρονης θεωρίας ηλεκτρονικής δομής, όπως πχ η μέθοδος tight-binding.