

Τεχνικές προσομοίωσης. Monte-Carlo και Moriaki Dinamiki. Στατιστικά σύνολα.
Αλγόριθμος Metropolis. Προβλήματα Φυσικής με τεχνικές προσομοίωσης: Διάχυση,
τυχαίες διαδρομές, κινητική, fractals. Συναρτήσεις κατανομών, συναρτήσεις
συσχετισμού.

Αριθμητικές προσομοιώσεις στα νανουλικά με τεχνικές και θεωρία όπως Density
functional theories (DFT) για Ab initio υπολογισμούς, Tight-binding approximation (TBA)
κατάλληλη για επέκταση για ημι-άπειρα κρυσταλλικά συστήματα.

Προσέγγιση Born-Oppenheimer - Επιφάνεια δυναμικής ενέργειας αντιδρώντων μορίων
- Συναρτήσεις επιμερισμού - Θεωρία της μεταβατικής κατάστασης (T.S.T.) -
Φαινόμενα μεταφοράς - Χημικές αντιδράσεις ελεγχόμενες μερικώς από τη διάχυση -
Θεωρία Kramers - Οξειδο-αναγωγικές χημικές αντιδράσεις, Θεωρία Marcus - Επίδραση
του φαινομένου σήραγγος στις χημικές αντιδράσεις - Κινητικό ισοτοπικό φαινόμενο -
Εισαγωγή στη Femto-Χημεία.

Διδάσκοντες: [Π. Αργυράκης](#), [Ε. Λοιδωρίκης](#), [Α. Λασκαράκης](#), [M. Damjanovic](#), [Γ. Βολωνάκης](#)

Διδακτικές Μονάδες: 3

Μονάδες ICTS: 7.5

Μοντέλα & Θεωρίες Μοριακών και Ατομικών Διεργασιών

Συντάχθηκε από τον/την Administrator

Σάββατο, 28 Αυγούστος 2010 17:26 - Τελευταία Ενημέρωση Τετάρτη, 26 Αυγούστος 2020 08:16
