

ΑΝΑΚΟΙΝΩΣΗ

Το ενδοπανεπιστημιακό δίκτυο «Θεωρητικός Σχεδιασμός Υλικών» (ΘΕΩΣΥ / NANOTHEO), στα πλαίσια της ακαδημαϊκής του δραστηριότητας, οργανώνει σειρά πέντε δίωρων μαθημάτων / σεμιναρίων «ΘΕΩΡΗΤΙΚΗΣ ΝΑΝΟΦΥΣΙΚΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΕΙΑΣ», που απευθύνονται κυρίως σε προπτυχιακούς και μεταπτυχιακούς φοιτητές της Σχολής Θετικών Επιστημών και της Πολυτεχνικής Σχολής, αλλά και σε κάθε άλλο ενδιαφερόμενο μέλος της Πανεπιστημιακής κοινότητας, με σκοπό την ενημέρωση και την ενεργό γνώση σε τρέχουσες θεωρητικές και υπολογιστικές μεθόδους σε επιλεγμένες σύγχρονες και καινοτόμες περιοχές της Νανο-Επιστήμης Υλικών, Νανο-Φυσικής και Χημείας.

Στόχος είναι η ενεργός γνώση και η αποτελεσματική και αξιόπιστη εφαρμογή σύγχρονων μεθόδων και τεχνικών της Θεωρητικής και Υπολογιστικής Νανοεπιστήμης, με παράλληλη γνώση των αρχών, και επίγνωση των περιορισμών, της ακριβείας, και της καταλληλότητας εκάστης μεθόδου.

Αν και τα σεμινάρια έχουν σχεδιαστεί κυρίως για προπτυχιακούς (3^ο – 4^ο έτος σπουδών) και μεταπτυχιακούς φοιτητές των τμημάτων της σχολής Θετικών Επιστημών (όπως Φυσικό, Χημικό, Φαρμακευτικό, Επιστήμης Υλικών) και της Πολυτεχνικής (κυρίως Χημικών Μηχανικών), οποιοδήποτε ενδιαφερόμενο μέλος της Πανεπιστημιακής κοινότητας είναι ευπρόσδεκτο.

Μια εβδομάδα πριν την λήξη των μαθημάτων, στις 24 Μαΐου, θα οργανωθεί ημερίδα με θέμα «Νανοθεωρητικές τεχνικές και εφαρμογές», η οποία θα περιλαμβάνει προσκεκλημένους ομιλητές από την Ελλάδα και το εξωτερικό. Κατά την διάρκεια της ημερίδας θα μπορούν να παρουσιαστούν (προφορικά ή σε αφίσα) κατάλληλες ερευνητικές εργασίες (ύστερα από κρίση) καθώς και εκπαιδευτικές/ερευνητικές εργασίες που θα ολοκληρωθούν στα πλαίσια αυτών των μαθημάτων.

Στους ενδιαφερόμενους που το επιθυμούν θα χορηγηθούν ειδικά πιστοποιητικά παρακολούθησης.

Πρόθεση μας είναι να συνεχίσουμε την οργάνωση και διεξαγωγή τέτοιων «μαθημάτων» και στις επόμενες ακαδημαϊκές χρονιές, χρησιμοποιώντας σαν πιλοτική εφαρμογή το εφετινό σεμινάριο.

Η Έναρξη των σεμιναρίων θα γίνει την Πέμπτη 18-4-2013, 11:00 π.μ.-13:00 μ.μ. στην Αίθουσα Φ5 του Τμήμα Φυσικής (Α΄ κτήριο Φυσικής 2^{ος} όροφος).

Οι ενδιαφερόμενοι καλούνται να δηλώσουν συμμετοχή στην ηλεκτρονική διεύθυνση zdetsis@upatras.gr μέχρι και την έναρξη του κύκλου των σεμιναρίων (Πέμπτη 18-4-2013 11:00 π. μ.

Περισσότερες πληροφορίες σχετικά με το επίπεδο, την διαδικασία, τα περιεχόμενα, την μεθοδολογία των μαθημάτων καθώς και τις εφαρμογές σε νανοδομημένα υλικά υψηλού τεχνικού και βιολογικού ενδιαφέροντος βρίσκονται στον σύνδεσμο:

<http://nanotheo.upatras.gr>

(και <http://moleng.physics.upatras.gr/>)

Ο Συντονιστής του δικτύου

Αριστείδης Ζδέτσης

Καθηγητής Φυσικού Τμήματος Πανεπιστημίου Πατρών

Συνοπτικές Λεπτομέρειες:

Έναρξη και (προσωρινό) ωράριο: Πέμπτη 18-4-2013, 11:00 π.μ.-13:00 μ.μ.

Τόπος: (τουλάχιστον για την πρώτη συνάντηση ή μέχρι να αποφασιστεί κάτι διαφορετικό) Τμήμα Φυσικής Αίθουσα Φ5. Α΄ κτήριο Φυσικής 2^{ος} Όροφος.

Διάρκεια: 5 περίπου εβδομάδες ένα (τουλάχιστον) δίωρο εβδομαδιαίως.

Επίπεδο: Κατάλληλο για τον μέσο όρο του αντιπροσωπευτικού ακροατή. Χωρίς πολύ εξιδανικευμένες γνώσεις και ορολογίες. Παιδαγωγικό και αποτελεσματικό

Διαδικασία: Διαλέξεις –«Φροντιστήρια»- «Εργαστήρια», που περιλαμβάνουν επίδειξη και «διδασκαλία» κατάλληλων προγραμμάτων με επίλυση, από τους φοιτητές, συγκεκριμένων επιλεγμένων προβλημάτων από το πεδίο ενδιαφέροντος τους (“hands on experience”)

Έκταση: (της κάθε ενότητας): Ανάλογα με τους διδάσκοντες και τους διδασκόμενους (και τις προτιμήσεις τους).

Προτεινόμενη Ύλη: (περιγραφικά):

- 1) Περιγραφή αντικειμένου – πεδίου ενδιαφέροντος (Χαρακτηριστικά και κρίσιμες ιδιότητες. Σύγχρονα θέματα και προβλήματα ενδιαφέροντος)
- 2) Βασικά χαρακτηριστικά προβλήματα και η αντιμετώπιση τους: Μια απλοϊκή προσέγγιση στο πρόβλημα των πολλών σωμάτων: Ιδανικά αέρια και «πραγματικά» υγρά και στερεά.
- 3) Κατάταξη και συνοπτική περιγραφή των θεωρητικών μεθόδων και τεχνικών στις διάφορες κλίμακες μεγέθους (μικροσκοπική , μεσοσκοπική, μακροσκοπική)
- 4) Θεμελιώδεις αρχές και προσεγγίσεις στην περιγραφή νανομορίων και νανοδομών από «πρώτες αρχές» (ab initio), χωρίς την εισαγωγή και ρύθμιση εμπειρικών ή/και αυθαίρετων παραμέτρων.
- 5) Εφαρμογή ab initio μεθόδων για την θεωρητική περιγραφή δομικών, ηλεκτρονικών, και οπτικών χαρακτηριστικών και ιδιοτήτων νανομορίων και νανοδομών.

- 6) Συνοπτική περιγραφή και εφαρμογή της «Θεωρίας Συναρτησιακού (ηλεκτρονικής) Πυκνότητας» (Density Functional Theory, “DFT”) στην ακριβή περιγραφή δομικών, ηλεκτρονικών, και οπτικών ιδιοτήτων νανοδομών και νανοδομημένων υλικών.
- 7) Συνδυασμένη χρήση εμπειρικών και ab initio μεθόδων για την περιγραφή μεγάλων και πολύπλοκων δομών – Διαδικασία πολλαπλών κλιμάκων (multiscaling approach).
- 8) Παρουσίαση και Ανάλυση εφαρμογών σε Σημαντικά, Σύγχρονα και Ενδιαφέροντα «νανοσυστήματα» υψηλού επιστημονικού, τεχνολογικού, και βιολογικού ενδιαφέροντος.
- 9) Επιλογές: *Νανοσωμάτια, Νανοκρύσταλοι, Νανοσωλήνες, Φουλερένια, Πολυμερή, Φαρμακολογικά μόρια και συστήματα, Πρωτεΐνες DNA, Γραφένιο, Συλισένιο, Νανοπορώδη, Καταλύτες, Βιο-καταλύτες, Φωτονικά υλικά, Μετα-υλικά κ.α.*
- 10) Εξελιγμένες μέθοδοι και εφαρμογές: Εξελιγμένα Συναρτησιακά και Μετα-Συναρτησιακά στην θεωρία DFT (New Functionals and Meta-Functionals)