

1. Αρχές Στατιστικής Μηχανικής

Δυναμικές τροχιές στο χώρο φάσεων. Πυκνότητα πιθανότητας στατιστικού συνόλου. Εξίσωση Liouville. Αναντιστρεπτότητα και επίτευξη θερμοδυναμικής ισορροπίας.

Στατιστικά σύνολα ισορροπίας: μικροκανονικό, κανονικό, ισόθερμο-ισοβαρές. Υπολογισμός θερμοδυναμικών ιδιοτήτων. Η πίεση (τάση) ως μέση τιμή στατιστικού συνόλου: θεώρημα virial. Το χημικό δυναμικό ως μέση τιμή στατιστικού συνόλου: θεώρημα Widom.

Μέγα κανονικό στατιστικό σύνολο για ανοικτά συστήματα: διακυμάνσεις πυκνότητας, υπολογισμός ισοθέρων ρόφησης.

Συναρτήσεις κατανομής για το χαρακτηρισμό της δομής, σχέσεις τους με θερμοδυναμικές ιδιότητες και με μετρήσεις περίθλασης ακτίνων X ή νετρονίων.

2. Μοριακές Προσομοιώσεις

Μοριακά ομοιότυπα (μοντέλα), συναρτήσεις δυναμικού, περιοδικές οριακές συνθήκες. Υπολογισμός της συνάρτησης δυναμικής ενέργειας.

Ολοκλήρωση Monte Carlo, δειγματοληψία Monte Carlo. Σύνδεση με θεωρία στοχαστικών ανεξίτητων. Αλγόριθμος Metropolis στα κανονικό, ισόθερμο-ισοβαρές και μέγα κανονικό στατιστικά σύνολα. Μεροληψία στο εγχείρημα στοιχειωδών κινήσεων και αντίστοιχοι κανόνες αποδοχής.

Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής (MD). Αλγόριθμοι για την ολοκλήρωση των δυναμικών εξισώσεων. Μοριακή δυναμική παρουσία ολονομικών περιορισμών υπαγορευομένων από τη μοριακή γεωμετρία. Μέθοδοι μοριακής δυναμικής σε στατιστικά σύνολα διάφορα του μικροκανονικού.

Ανάλυση των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων για τον υπολογισμό δομικών, θερμοδυναμικών και δυναμικών ιδιοτήτων. Συναρτήσεις χρονικής αυτοσυσχέτισης και σχέση τους με φασματοσκοπικές μετρήσεις.

Στοιχεία θεωρίας γραμμικής απόκρισης. Υπολογισμός συντελεστών μεταφοράς (διαχυτότητας, θερμικής αγωγιμότητας, ιξώδους).

3. Τεχνικές για μεγάλες κλίμακες μηκών και χρόνων

Αδροποίηση (coarse-graining) και αναγωγή σε μοντέλα με λιγότερους βαθμούς ελευθερίας για τη μελέτη φαινομένων σε μεγάλες κλίμακες μήκους και χρόνου. Προβολή των εξισώσεων κίνησης πάνω σε λίγους, αργά μεταβαλλόμενους βαθμούς ελευθερίας. Στοιχεία θεωρίας κίνησης Brown. Αρχές των μεθόδων Brownian Dynamics, Dissipative Particle Dynamics.

Θεωρία μεταβατικών καταστάσεων για την εκτίμηση του ρυθμού σπάνιων συμβάντων. Εξίσωση Kramers για τη σταθερά ρυθμού μετάβασης. Θεωρία Bennett-Chandler για τον προσδιορισμό σταθεράς ρυθμού από προσομοιώσεις. Προσδιορισμός τροχιών μετάβασης και σταθερών ρυθμού σε συστήματα με πολλούς, συνεξυγμένους αργούς βαθμούς ελευθερίας.

Στοχαστικές ανεξίτητες Poisson που προκύπτουν από αλληλουχία σπάνιων συμβάντων. Εξίσωση Master. Κινητική προσομοίωση Monte Carlo.

4. Εφαρμογές

Συζήτηση παραδειγμάτων υπολογισμών μοριακής προσομοίωσης για κατανόηση και πρόρρηση δομής, θερμοδυναμικών και ρεολογικών ιδιοτήτων πολυμερικών τμημάτων μεγάλου μοριακού βάρους, διαπερατότητας πολυμερικών μεμβρανών, δομής και λειτουργίας λιπιδικών μεμβρανών και βιολογικών μακρομορίων, φαινομένων αυτο-οργάνωσης συμπολυμερών και πολυμερών σε διεπιφάνειες, ρόφησης και διάχυσης σε

ζεολίθους, δομικής χαλάρωσης και μηχανικών ιδιοτήτων στην υαλώδη κατάσταση, λεπτών υμενίων, νανοσωματιδίων και νανοσυνθέτων υλικών.