

**Αφιερώνεται**  
**στη μνήμη των γονέων μου**  
**Νικολάου και Ζαχαρώς**



## ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

		Σελίδα
	<b>ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΠΡΩΤΟ</b>	
	<b>ΒΑΣΙΚΕΣ ΠΡΑΞΕΙΣ ΤΗΣ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗΣ ΑΝΑΛΥΣΗΣ</b>	1
1.1	ΕΥΡΕΣΗ ΤΩΝ ΡΙΖΩΝ ΕΝΟΣ ΠΟΛΥΩΝΥΜΟΥ	2
1.1.1	Εύρεση περιοχών στις οποίες η $f(x)$ αλλάζει πρόσημο	2
1.1.2	Μέθοδος των Newton-Raphson	3
1.2	ΜΕΘΟΔΟΙ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗΣ ΛΥΣΕΩΣ ΓΡΑΜΜΙΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ: ΕΜΜΕΣΕΣ Ή ΕΠΑΝΑΛΗΠΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ	5
1.2.1	Μεθοδος Jacobi	6
1.2.2	Μέθοδος των Gauss-Seidel	7
1.3	ΕΥΡΕΣΗ ΣΥΜΠΤΩΤΙΚΟΥ ΠΟΛΥΩΝΥΜΟΥ ΚΑΙ ΠΟΛΥΩΝΥΜΟΥ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗΣ	8
1.3.1	Εύρεση συμπτωτικού πολυωνύμου με την βοήθεια λύσης γραμμικών συστημάτων	9
1.3.2	Εύρεση του συμπτωτικού πολυωνύμου με την μέθοδο Lagrange	11
1.3.3	Εύρεση του συμπτωτικού πολυωνύμου με την μέθοδο Newton προς τα εμπρός (Newton's forward method)	13
1.3.4	Περιγραφή δεδομένων με πολυώνυμο προσέγγισης: Η μέθοδος των ελαχίστων τετραγώνων	15
1.3.5	Πολυώνυμο προσέγγισης πρώτου βαθμού	16
1.4	ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗ ΚΑΙ ΠΑΡΑΓΩΓΙΣΗ	19
1.4.1	Σφάλμα αποκοπής αριθμητικών ολοκληρωμάτων	22
1.5	ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΑΤΟΣ ΚΥΡΙΑΣ ΤΙΜΗΣ (principal value integrals) – Υπολογισμός ολοκληρώματος τύπου Kramer-Krönig	24
	1Π.1 Πρόγραμμα: newton_raphson	27
	1Π.2 Πρόγραμμα: newton Εύρεση συμπτωτικού πολυωνύμου με την μέθοδο Newton (προς τα εμπρός)	30
	1Π.3 Πρόγραμμα: linear_fit	35
	1Π.4 Πρόγραμμα: parabolic_fit	37
	1Π.5 Πρόγραμμα : green0 Υπολογισμός ολοκληρώματος τύπου Kramer-Krönig	39
1.6	ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΙ ΕΠΙΛΥΣΗΣ ΤΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ ΚΙΝΗΣΗΣ ΤΟΥ NEWTON	42
1.6.1	Ο αλγόριθμος του Euler	43
1.6.2	Ο αλγόριθμος των Feynman και Newton	44
1.6.3	Ο αλγόριθμος του Verlet	44
1.6.4	Ο αλγόριθμος των Runge-Kutta (για βαθμωτές συναρτήσεις)	44
1.6.5	Σχεδιασμός προγραμμάτων επίλυσης της εξίσωσης κίνησης	45
	1.6.5.1 Αρχικός σχεδιασμός	45
	1.6.5.2 Δεύτερος σχεδιασμός	47
	1.6.5.3 Σχεδιασμός προγράμματος με χρήση αλγορίθμου Runge-Kutta	49
1.6.6	Αριθμητική επίλυση διαφορικής εξίσωσης πίνακα	50
	1Π.6 Πρόγραμμα: RK_matrix	52
	1Π.7 Πρόγραμμα: shooting1	56
1.6.7	Ο αλγόριθμος του Numeron	61
1.7	ΕΛΕΓΧΟΣ ΑΚΡΙΒΕΙΑΣ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΩΝ ΛΥΣΕΩΝ ΚΑΙ ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ	64
	<b>Ασκήσεις A1.1 - A1.20</b>	67
	<b>ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΔΕΥΤΕΡΟ</b>	74
	<b>Απλά προβλήματα από την κλασική και κβαντική φυσική</b>	
2.1	ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΚΙΝΗΣΗΣ ΣΩΜΑΤΟΣ ΠΟΥ ΠΕΦΤΕΙ ΕΛΕΥΘΕΡΑ ΣΤΟΝ ΑΕΡΑ	74
2.2	ΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΤΗΣ ΚΙΝΗΣΗΣ ΣΤΟ ΧΩΡΟ 2-ΔΙΑΣΤΑΣΕΩΝ	76
2.3	ΜΕΛΕΤΗ ΚΙΝΗΣΗΣ ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΟΥ ΣΤΕΡΕΩΜΕΝΟΥ ΣΕ ΕΛΑΤΗΡΙΟ	77
	Test Program : spring	80
	Test program : spring1	81

2.4		ΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΤΟΥ ΕΚΚΡΕΜΟΥΣ	83
	Test	Program : pendulum	86
2.5		ΚΥΚΛΩΜΑ ΜΕ ΠΥΚΝΩΤΗ ΚΑΙ ΑΝΤΙΣΤΑΣΗ	88
2.6		ΙΔΙΟΚΑΤΑΣΤΑΣΕΙΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ ΣΕ ΠΗΓΑΔΙ ΣΤΑΘΕΡΟΥ ΔΥΝΑΜΙΚΟΥ ΜΙΑΣ ΔΙΑΣΤΑΣΗΣ	91
	Test	program: pwell_plot	93
	2Π.1	Πρόγραμμα pwell Εύρεση ιδιοκαταστάσεων ηλεκτρονίου σε μονοδιάστατο πηγάδι σταθερού δυναμικού	95
	2Π.2	Πρόγραμμα: shooting2	99
2.7		ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ ΤΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ LAPLACE ΚΑΙ POISSON	107
	2.7.1	Ανάπτυξη αλγορίθμου : Αυτοσυμβιβαστή μέθοδος	108
	2Π.3	Πρόγραμμα : laplace	110
2.8		ΜΟΝΟΔΙΑΣΤΑΤΟ ΦΡΑΓΜΑ ΔΥΝΑΜΙΚΟΥ : ΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΤΗΣ ΜΕΤΑΛΛΙΚΗΣ ΕΠΙΦΑΝΕΙΑΣ	116
	2Π.4	Πρόγραμμα : msurface	122
2.9		ΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΤΗΣ ΜΕΤΑΛΛΙΚΗΣ ΕΠΙΦΑΝΕΙΑΣ ΣΤΗ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ ΤΗΣ ΤΟΠΙΚΗΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΗΣ ΠΥΚΝΟΤΗΤΑΣ	128
		<b>Ασκήσεις A2.1 - A2.23</b>	134

### ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΤΡΙΤΟ

#### Εξοικείωση με τα κρυσταλλικά πλέγματα

3.1		ΒΑΣΙΚΕΣ ΕΝΝΟΙΕΣ : ΑΝΥΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΕΠΙΠΕΔΑ	147
3.2		ΠΛΕΓΜΑΤΑ ΧΩΡΟΥ : ΠΛΕΓΜΑΤΑ BRAVAIS	148
3.3		ΑΝΥΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΕΠΙΠΕΔΑ ΠΛΕΓΜΑΤΩΝ	149
3.4		ΤΟ ΑΝΑΣΤΡΟΦΟ ΠΛΕΓΜΑ	150
3.5		ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙΣ ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΗΣ ΣΥΜΜΕΤΡΙΑΣ - ΣΕΙΡΕΣ FOURIER	152
	3Π.1	Πρόγραμμα : vectors Υπολογισμός ανυσμάτων ευθέως και αναστρόφου πλέγματος και εφαρμογές	154
	3Π.2	Πρόγραμμα : madelung Υπολογισμός της σταθεράς Madelung : Μέθοδος απλής άθροισης	164
	3Π.3	Πρόγραμμα : ewald Υπολογισμός της σταθεράς Madelung: Μέθοδος Ewald	169
	3Π.4	Υποπρόγραμμα : FUNCTION fmch Υπολογισμός του ολοκληρώματος $\int_0^1 e^{-Wt^2} t^{2M} dt$ , $MeI$ , $WeR$	179
	3Π.5	Πρόγραμμα : sound Υπολογισμός της θερμοκρασίας Debye από τις ελαστικές σταθερές	184
	3Π.6	Υποπρόγραμμα : subroutine cubeqn(a1,a2,a3,x1,x2,x3) Λύση τριτοβάθμιας αλγεβρικής εξίσωσης	201
		<b>Ασκήσεις A3.1 - A3.20</b>	204

### ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΤΕΤΑΡΤΟ

#### Υπολογισμός της δομής των ηλεκτρονιακών ζωνών κρυσταλλικών συστημάτων

4.1		ΤΟ ΠΡΟΤΥΠΟ ΤΩΝ KRÖNIG – PENNEY	215
	4.1.1	Μέθοδος 1: Λύση στην μομαδιαία κυψελίδα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες	216
	4.1.2	Μέθοδος 2: Λύση με ανάπτυξη σε επίπεδα κύματα	219
	4Π.1	Πρόγραμμα : kronig Υπολογισμός της δομής των ενεργειακών ζωνών κατά το πρότυπο των Krönig-Penney	222
4.2		ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΩΝ ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΩΝ ΖΩΝΩΝ ΣΕ ΜΕΤΑΛΛΑ ΜΕ ΣΧΕΔΟΝ ΕΛΕΥΘΕΡΑ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑ	229
	4.2.1	Χρήση υποπρογραμμάτων διαγωνοποίησης πίνακα	232
	4.2.2	Χαρακτηριστικά σημεία της δομής των ενεργειακών ζωνών	234
	4Πρ1	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 4Πρ1	

		Υπολογισμός συντελεστών Fourier του ιοντικού δυναμικού	236
	4Π.2	Πρόγραμμα : ashcroft	
4.3		Υπολογισμός της δομής των Ενεργειακών ζωνών στη προσέγγιση τοπικού ψευδοδυναμικού Ashcroft	237
		ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΟΥ ΓΡΑΜΜΙΚΟΥ ΣΥΝΔΥΑΣΜΟΥ ΑΤΟΜΙΚΩΝ ΤΡΟΧΙΑΚΩΝ (ΓΣΑΤ)	244
	4Πρ2	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 4Πρ2	
		Επίλυση της εξίσωσης Schrodinger στην προσέγγιση της ισχυρής σύζευξης	255
	4Π.3	Πρόγραμμα : tightb1	
		Υπολογισμός δομής ηλεκτρονιακών ζωνών ημιαγωγών με κρυσταλλική δομή απλού κυβικού πλέγματος	256
	4Π.4	Πρόγραμμα : tightb2	
		Υπολογισμός δομής ηλεκτρονιακών ζωνών ημιαγωγών με κρυσταλλική δομή απλού διαμαντιού	260
	4Π.5	Πρόγραμμα : tightb3	265
		Υπολογισμός δομής ηλεκτρονιακών ζωνών ημιαγωγών με κρυσταλλική δομή κυβικού θειούχου ψευδαργύρου	
4.4		ΠΥΚΝΟΤΗΤΑ ΤΩΝ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΩΝ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΩΝ	270
		Ασκήσεις A4.1 - A4.19	272
		<b>ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΠΕΜΠΤΟ</b>	
		<b>Ατομικοί και μοριακοί υπολογισμοί</b>	279
5.1		ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΟΥ HARTREE ΓΙΑ ΑΤΟΜΑ	280
	5.1.1	Διάγραμμα ροής λύσης με τη μέθοδο Hartree	283
5.2		ΑΝΑΛΥΤΙΚΗ – ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΜΕΘΟΔΟΣ ΛΥΣΕΩΣ	284
5.3		ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ HARTREE-FOCK (HF)	287
	5Πρ1	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 5Πρ1 : Η λαπλασιανή σε σφαιρικές συντεταγμένες	290
	5Πρ2	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 5Πρ2 : Υπολογισμός μονοηλεκτρονιακών ολοκληρωμάτων	291
	5Πρ3	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 5Πρ3 : Υπολογισμός των ολοκληρωμάτων Coulomb και ανταλλαγής	292
	5Π.1	Πρόγραμμα : hartree	
		Λύση της εξίσωσης Schrodinger στην προσέγγιση Hartree-Fock για άτομα με κυματοσυναρτήσεις τύπου-s	293
5.4		ΛΥΣΗ ΤΟΥ ΠΡΟΤΥΠΟΥ HARTREE-FOCK ΜΕ ΤΗ ΘΕΩΡΙΑ ΤΩΝ ΜΕΤΑΒΟΛΩΝ	309
5.5		ΜΕΘΟΔΟΣ ROOThAAN ΓΙΑ ΑΤΟΜΑ ΚΑΙ ΜΟΡΙΑ ΜΕ ΚΛΕΙΣΤΟΥΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΟΥΣ ΦΛΟΙΟΥΣ	310
	5.5.1	Υπολογισμός του πίνακα $S^{-1/2}$	315
	5.5.2	Υπολογισμός και αποθήκευση ολοκληρωμάτων	316
	5.5.3	Διάγραμμα ροής αλγορίθμου λύσεως με τη μέθοδο Roothaan	321
5.6		ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΟ ΒΟΗΘΗΜΑ ΓΙΑ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΥΣ ΣΕ ΜΟΡΙΑ	322
	5Π.2	Πρόγραμμα : h_molecule	
		Το μόριο H <sub>2</sub> στην προσέγγιση Roothaan-Hartree-Fock	327
		Ασκήσεις A5.1 - A5.17	349
		<b>ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΕΚΤΟ</b>	356
		<b>Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής</b>	
6.1		ΑΡΙΘΜΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΜΙΑΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ	357
6.2		ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΚΙΝΗΣΗΣ	358
6.3		ΣΥΝΟΡΙΑΚΕΣ ΣΥΝΘΗΚΕΣ	359
	6.3.1	Προβλήματα με μεγάλο αριθμό ατόμων/μορίων: Περιοδικές συνοριακές συνθήκες	359
	6.3.2	Προβλήματα με μικρό αριθμό ατόμων : Πάγωμα και απόσβεση κίνησης	362
6.4		ΤΟ ΔΥΝΑΜΙΚΟ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ ΣΕ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ ΚΛΑΣΙΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ	363
6.5		ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΣΥΣΤΗΜΑΤΟΣ ΜΕ ΔΥΝΑΜΙΚΟ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗΣ LENNARD-JONES	365
	6Π.1	Πρόγραμμα : molecdyn	
		Προσομοίωση συστήματος με δυναμικό αλληλεπίδρασης τύπου Lennard-Jones	367

	6Π.1.1	Στοιχεία εισόδου του προγράμματος molecdyn	368
	6Π.1.2	Μονάδες μέτρησης	369
	6Π.1.3	Περιγραφή υποπρογραμμάτων του προγράμματος molecdyn	372
	6Π.1.4	Δεδομένα εξόδου του προγράμματος molecdyn	372
	6Π.1.5	Αξιολόγηση αποτελεσμάτων	373
	6Π.1.6	Περαιτέρω αξιοποίηση των αποτελεσμάτων	377
6.6		ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ ΜΕ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΕΙΣ ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗΣ	391
6.7		ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ ΕΦΑΡΜΟΓΗΣ ΤΟΥ ΠΡΟΤΥΠΟΥ ΤΗΣ ΙΣΧΥΡΗΣ ΣΥΖΕΥΞΗΣ ΣΕ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ: Αλληλεπίδραση δύο ατόμων	393
6Π.2		Πρόγραμμα cluster Προσομοίωση ομάδας ατόμων σε προσέγγιση ισχυρής σύζευξης	395
	6Π.2.1	Ο Ελκτικός όρος	396
	6Π.2.2	Ο Απωστικός όρος	399
	6Π.2.3	Υπολογισμός δυνάμεων	399
	6Π.2.4	Ελαχιστοποίηση της δυναμικής ενέργειας	401
	6Π.2.5	Στοιχεία εισόδου του προγράμματος cluster	401
	6Π.2.6	Εκτέλεση του προγράμματος cluster	402
6.8		ΣΥΓΧΡΟΝΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ	403
		<b>Ασκήσεις A6.1 - A6.10</b>	418
		<b>ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΕΒΔΟΜΟ</b>	
		<b>Προσομοιώσεις Monte-Carlo</b>	422
7.1		ΚΑΤΑΝΟΜΕΣ POISSON ΚΑΙ GAUSS: Σύντομη ανασκόπηση	422
	7.1.1	Διωνυμική κατανομή	425
7.2		ΤΥΧΑΙΟΙ ΑΡΙΘΜΟΙ ΚΑΙ ΓΕΝΝΗΤΟΡΕΣ ΤΟΥΣ	425
7.3		ΒΑΣΙΚΕΣ ΑΡΧΕΣ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ MONTE-CARLO	427
	7.3.1	Παραδείγματα εφαρμογής του αξιόματος συσχέτισης	428
7.4		ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΗ ΤΗΣ ΣΧΕΣΗΣ $r=f(p(x))$	437
7.5		Η ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΗΣ ΑΠΟΡΡΙΨΗΣ ΤΟΥ von NEUMANN	438
7.6		ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΑΤΩΝ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ MONTE CARLO	441
	7.61	Παραδείγματα υπολογισμού ολοκληρωμάτων με τη μέθοδο Monte Carlo	443
7.7		ΧΡΗΣΗ ΤΗΣ ΣΥΝΑΡΤΗΣΗΣ ΒΑΡΟΥΣ	445
7.8		ΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΤΟΥ ΤΥΧΑΙΟΥ ΠΕΡΙΠΑΤΟΥ ΣΕ ΜΙΑ ΔΙΑΣΤΑΣΗ: ΕΝΑΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ MONTE CARLO	446
	7Π.1	Πρόγραμμα drunk : Περίπατος (τυχαίος) μεθυσμένου	448
7.9		ΔΙΑΧΥΣΗ ΜΕ ΣΚΕΔΑΣΗ ΤΥΠΟΥ ΣΚΛΗΡΗΣ ΣΦΑΙΡΑΣ	451
	7.9.1	Ανάλυση του προτύπου	451
	7.9.2	Σχεδιασμός προγράμματος	453
	7.9.3	Περιγραφή αλγορίθμου	454
	7Π.2	Πρόγραμμα: diffusion Πρόβλημα διάχυσης σε διδιάστατο χώρο κατά το πρότυπο σκέδασης της σκληρής σφαίρας (§7.9)	456
7.10		ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΤΟΥ METROPOLIS	460
7.11		ΤΟ ΠΡΟΤΥΠΟ ISING	461
	7Π.3	Πρόγραμμα mc_ising	461
		<b>Ασκήσεις A7.1 - A7.18</b>	
		<b>ΑΛΦΑΒΗΤΙΚΟ ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ</b>	479