

ΠΕΡΙΓΡΑΜΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

(1) ΓΕΝΙΚΑ

ΣΧΟΛΗ	ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ		
ΤΜΗΜΑ	ΧΗΜΕΙΑΣ		
ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΟ		
ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	614 Θ	ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	6
ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ ΙΙΙ		
ΑΥΤΟΤΕΛΕΙΣ ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ <i>σε περίπτωση που οι πιστωτικές μονάδες απονέμονται σε διακριτά μέρη του μαθήματος π.χ. Διαλέξεις, Εργαστηριακές Ασκήσεις κ.λπ. Αν οι πιστωτικές μονάδες απονέμονται ενιαία για το σύνολο του μαθήματος αναγράψτε τις εβδομαδιαίες ώρες διδασκαλίας και το σύνολο των πιστωτικών μονάδων</i>	ΕΒΔΟΜΑΔΙΑΙΕΣ ΩΡΕΣ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ	ΠΙΣΤΩΤΙΚΕΣ ΜΟΝΑΔΕΣ	
Διαλέξεις	4	6,5	
<i>Προσθέστε σειρές αν χρειαστεί. Η οργάνωση διδασκαλίας και οι διδακτικές μέθοδοι που χρησιμοποιούνται περιγράφονται αναλυτικά στο (δ).</i>			
ΤΥΠΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ <i>γενικού υποβάθρου, ειδικού υποβάθρου, ειδίκευσης γενικών γνώσεων, ανάπτυξης δεξιοτήτων</i>	Επιστημονικής περιοχής, Γενικού υποβάθρου.		
ΠΡΟΑΠΑΙΤΟΥΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ:	Όχι		
ΓΛΩΣΣΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ και ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ:	Ελληνική		
ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ ΠΡΟΣΦΕΡΕΤΑΙ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ERASMUS	Ναι		
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΣΕΛΙΔΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ (URL)	http://jupiter.chem.uoa.gr		

(2) ΜΑΘΗΣΙΑΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Μαθησιακά Αποτελέσματα

Περιγράφονται τα μαθησιακά αποτελέσματα του μαθήματος οι συγκεκριμένες γνώσεις, δεξιότητες και ικανότητες καταλλήλου επιπέδου που θα αποκτήσουν οι φοιτητές μετά την επιτυχή ολοκλήρωση του μαθήματος.

Συμβουλευτείτε το Παράρτημα Α

- Περιγραφή του Επιπέδου των Μαθησιακών Αποτελεσμάτων για κάθε ένα κύκλο σπουδών σύμφωνα με το Πλαίσιο Προσόντων του Ευρωπαϊκού Χώρου Ανώτατης Εκπαίδευσης
- Περιγραφικοί Δείκτες Επιπέδων 6, 7 & 8 του Ευρωπαϊκού Πλαισίου Προσόντων Διά Βίου Μάθησης και το Παράρτημα Β
- Περιληπτικός Οδηγός συγγραφής Μαθησιακών Αποτελεσμάτων

- Το μάθημα αποτελεί μία πρώτη εισαγωγή στην κβαντική θεωρία για την ύλη. Σκοπός του είναι οι φοιτητές να κατανοήσουν τις βασικές αρχές που διέπουν τον μικρόκοσμο και συνεπώς τα άτομα και τα μόρια. Συγκεκριμένα γίνεται συστηματική εισαγωγή στους νόμους της κβαντικής μηχανικής χρησιμοποιώντας απλά παραδείγματα για τα οποία η εξίσωση Schrödinger επιλύεται ακριβώς (φρέαρ δυναμικού, αρμονικός ταλαντωτής). Επί πλέον γίνεται μαθηματική θεμελίωση της θεωρίας και του φορμαλισμού της (τελεστές, μεταθέτες, κλπ). Στη συνέχεια επιλύεται αναλυτικά το πρόβλημα του ατόμου του υδρογόνου και εισάγεται η έννοια του ατομικού τροχιακού και ερμηνεύεται το φάσμα του ατόμου. Γίνεται εισαγωγή στις προσεγγιστικές θεωρίες και την εφαρμογή τους στην αντιμετώπιση του προβλήματος πολυηλεκτρονιακών ατόμων και μορίων. Εισάγεται η έννοια του spin και η αρχή του Pauli (αντισυμμετρία) και η σημασία αυτής στην δόμηση του περιοδικού πίνακος. Τέλος με την μελέτη απλών μορίων (π.χ. H_2^+) γίνεται μία πρώτη προσέγγιση στο μηχανισμό δημιουργίας του χημικού δεσμού.
- Με την επιτυχή ολοκλήρωση του μαθήματος ο φοιτητής αναμένεται
 - Να έχει αποκτήσει μία ουσιαστική γνώση για τους νόμους που διέπουν τον μικρόκοσμο και πιο συγκεκριμένα ως μελλοντικός χημικός τα άτομα και τα μόρια.
 - Να κατανοεί σε βάθος κάποιες ως τότε «αόριστες» έννοιες όπως τα τροχιακά και οι κυματοσυναρτήσεις γενικότερα.
 - Να κατανοεί τα ατομικά και μοριακά φάσματα (ηλεκτρονικά, δονητικά, περιστροφικά) ως αποτέλεσμα της κβαντικής φύσης της ύλης και να είναι σε θέση να τα προβλέψει προσεγγιστικά με βάση την αντίστοιχη κβαντική θεωρία.
 - Να έχει το απαραίτητο υπόβαθρο ώστε εάν επιθυμεί να συνεχίσει και να ασχοληθεί περαιτέρω με τον ευρύτερο κλάδο της κβαντικής υπολογιστικής χημείας.

Γνώσεις

- Γνώση των βασικών αρχών της κβαντικής μηχανικής
- Γνώση της χρήσης της εξίσωσης Schrödinger και της σημασίας των λύσεων αυτής

- Γνώση του μαθηματικού φορμαλισμού που χρησιμοποιεί η κβαντική χημεία (κυματοσυναρτήσεις, τελεστές, μεταθέτες, αναμενόμενες τιμές, κλπ)
- Γνώση της λύσης της εξίσωσης Schrödinger για τον αρμονικό ταλαντωτή και την εφαρμογή της στα δονητικά φάσματα διατομικών μορίων.
- Γνώση της έννοιας της στροφορμής και των σφαιρικών αρμονικών καθώς και την σημασία τους στη μελέτη περιστροφικών φασμάτων όπως και στην δόμηση των ατομικών τροχιακών
- Γνώση της αναλυτικής λύσης του προβλήματος του ατόμου του υδρογόνου, ενδελεχής κατανόηση των ατομικών τροχιακών και των κβαντικών αριθμών που τα χαρακτηρίζουν και πρόβλεψη του φάσματος του ατόμου
- Γνώση της χρήσης της θεωρίας παραλλαγών για την προσεγγιστική λύση του προβλήματος πολυηλεκτρονιακών συστημάτων
- Γνώση με μαθηματική θεμελίωση της έννοιας του ηλεκτρονιακού spin, της αρχής της αντισυμμετρίας και της αρχής του Pauli
- Γνώση της εφαρμογής της θεωρίας παραλλαγών σε μοριακά συστήματα και κατανόηση της δημιουργίας του χημικού δεσμού με βάση την κβαντική θεωρία

Δεξιότητες

- Δεξιότητα στη χρήση του μαθηματικού φορμαλισμού και της μεθοδολογίας της κβαντικής χημείας

Ικανότητες

- Ικανότητα πρόβλεψης και ερμηνείας φυσικοχημικών φαινομένων και μοριακών ιδιοτήτων με βάση την κβαντική θεωρία

Γενικές Ικανότητες

Λαμβάνοντας υπόψη τις γενικές ικανότητες που πρέπει να έχει αποκτήσει ο πτυχιούχος (όπως αυτές αναγράφονται στο Παράρτημα Διπλώματος και παρατίθενται ακολούθως) σε ποια / ποιες από αυτές αποσκοπεί το μάθημα;

Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με τη χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών

Προσαρμογή σε νέες καταστάσεις

Λήψη αποφάσεων

Αυτόνομη εργασία

Ομαδική εργασία

Εργασία σε διεθνές περιβάλλον

Εργασία σε διεπιστημονικό περιβάλλον

Σχεδιασμός και διαχείριση έργων

Σεβασμός στη διαφορετικότητα και στην πολυπολιτισμικότητα

Σεβασμός στο φυσικό περιβάλλον

Επίδειξη κοινωνικής, επαγγελματικής και ηθικής υπευθυνότητας

και ευαισθησίας σε θέματα φύλου

Άσκηση κριτικής και αυτοκριτικής

Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης

.....

Άλλες...

<p>Γλώσσα Αξιολόγησης, Μέθοδοι αξιολόγησης, Διαμορφωτική ή Συμπερασματική, Δοκιμασία Πολλαπλής Επιλογής, Ερωτήσεις Σύντομης Απάντησης, Ερωτήσεις Ανάπτυξης Δοκιμίων, Επίλυση Προβλημάτων, Γραπτή Εργασία, Έκθεση / Αναφορά, Προφορική Εξέταση, Δημόσια Παρουσίαση, Εργαστηριακή Εργασία, Κλινική Εξέταση Ασθενούς, Καλλιτεχνική Ερμηνεία, Άλλη / Άλλες</p> <p>Αναφέρονται ρητά προσδιορισμένα κριτήρια αξιολόγησης και εάν και που είναι προσβάσιμα από τους φοιτητές.</p>	<p>γλώσσα με τελική εξέταση στο σύνολο της ύλης και περιλαμβάνει: Ερωτήσεις κατανόησης της θεωρίας και επίλυση προβλημάτων.</p>
--	--

(5) ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ-ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

<p>-Προτεινόμενη Βιβλιογραφία : P. W. Atkins, Μοριακή Κβαντική Χημεία, Εκδόσεις Παπαζήση. -Συναφή επιστημονικά περιοδικά:</p>
