

ΠΕΡΙΓΡΑΜΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

(1) ΓΕΝΙΚΑ

ΣΧΟΛΗ	ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ		
ΤΜΗΜΑ	ΧΗΜΕΙΑΣ		
ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	Μεταπτυχιακό		
ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	18B0	ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	3
ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	Υπολογιστική Χημεία - Προσομοίωση ιδιοτήτων υλικών με τεχνολογικό ενδιαφέρον		
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	
<i>Διαλέξεις</i>	8	10	
<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>	ΕΙΔΙΚΟΥ ΥΠΟΒΑΘΡΟΥ, ΕΙΔΙΚΕΥΣΗΣ ΓΕΝΙΚΩΝ ΓΝΩΣΕΩΝ, ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ ΔΕΞΙΟΤΗΤΩΝ		
ΠΡΟΑΠΑΙΤΟΥΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ:	ΟΧΙ		
ΓΛΩΣΣΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ και ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ:	ΕΛΛΗΝΙΚΑ		
ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ ΠΡΟΣΦΕΡΕΤΑΙ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ERASMUS	ΕΑΝ ΧΡΕΙΑΣΘΕΙ ΝΑΙ		
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΣΕΛΙΔΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ (URL)	https://eclass.uoa.gr/courses/CHEM258/		

(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

Βασικός στόχος του μαθήματος είναι η γνωριμία με τις υπολογιστικές μεθόδους επίλυσης προβλημάτων της επιστήμης της Χημείας.

Ειδικότερα στα πλαίσια του συγκεκριμένου μαθήματος διδάσκονται:

- Μέθοδοι που βασίζονται στη θεωρία των μοριακών τροχιακών (ab-initio) και στο συναρτησιακό ηλεκτρονιακής πυκνότητας (DFT) και η εφαρμογή τους σε προβλήματα που αφορούν υλικά με τεχνολογικές εφαρμογές.
- Υπολογιστικά πακέτα (Gaussian, MOPAC, κ.α.) και ανάλυση των δυνατοτήτων τους.
- Προβλήματα υπολογισμού ολικής ενέργειας και βελτιστοποίησης της δομής μοριακών συστημάτων και παρουσιάζονται τεχνικές μελέτης της τοπικής δομής συστημάτων που εκτείνονται σε μεγαλύτερη έκταση (κρυσταλλικά και άμορφα υλικά, επιφάνειες, νανοϋλικά, κ.α.).
- υπολογιστική μελέτη της επίδρασης της παρουσίας διαλύτη.
- Η υπολογιστική μελέτη της αλληλεπίδρασης (ισχυρή ή ασθενής) μεταξύ των μορίων.
- Ο υπολογισμός των ηλεκτρικών ιδιοτήτων (διπολική ροπή, πολωσιμότητα, πολυπολικές ροπές).
- Ο υπολογισμός των ατομικών φορτίων και της ηλεκτροστατικής επιφάνειας.
- Η προσομοίωση φασμάτων απορρόφησης, δόνησης και NMR.

Τέλος τα παραπάνω συνδέονται με τα ερευνητικά projects (Διπλωματικές Εργασίες) των φοιτητών.

Γνώσεις

- Γνώση και κατανόηση των μεθόδων που βασίζονται στη θεωρία των μοριακών τροχιακών (ab-initio) και στο συναρτησιακό ηλεκτρονιακής πυκνότητας (DFT) καθώς και η εφαρμογή τους σε προβλήματα που αφορούν υλικά με τεχνολογικές εφαρμογές.
- Γνώση και κατανόηση μεθόδων και προβλημάτων υπολογισμού ολικής ενέργειας και βελτιστοποίησης της δομής μοριακών συστημάτων (με ή χωρίς διαλυτικό μέσο) καθώς και τεχνικών μελέτης της τοπικής δομής συστημάτων που εκτείνονται σε μεγαλύτερη έκταση (κρυσταλλικά και άμορφα υλικά, επιφάνειες, νανοϋλικά, κ.α.).

- Γνώση και κατανόηση της χρήσης των ανωτέρω στο σχεδιασμό και την ανάλυση των ερευνητικών projects (Διπλωματικές εργασίες) των φοιτητών.

Δεξιότητες

- Δεξιότητα στην επιλογή των κατάλληλων υπολογιστικών μεθόδων (ab-initio ή/και DFT) και στην εφαρμογή τους σε προβλήματα που αφορούν υλικά με τεχνολογικές εφαρμογές.
- Δεξιότητα στην χρήση υπολογιστικών πακέτων (Gaussian, MOPAC, κ.α.) και στην ανάλυση των δυνατοτήτων τους.
- Δεξιότητα στην επίλυση προβλημάτων υπολογισμού ολικής ενέργειας και βελτιστοποίησης της δομής μοριακών συστημάτων και συστημάτων που εκτείνονται σε μεγαλύτερη έκταση (κρυσταλλικά και άμορφα υλικά, επιφάνειες, νανοϋλικά, κ.α.).
- Δεξιότητα στην υπολογιστική μελέτη χημικών συστημάτων μέσα σε περιβάλλον διαλυτικού μέσου.
- Δεξιότητα στην μελέτη της αλληλεπίδρασης (ισχυρή ή ασθενής) μεταξύ των μορίων, στον υπολογισμό ηλεκτρικών ιδιοτήτων (διπολική ροπή, πολωσιμότητα, πολυπολικές ροπές), στον υπολογισμό ατομικών φορτίων και της ηλεκτροστατικής επιφάνειας καθώς και στην προσομοίωση φασμάτων απορρόφησης, δόνησης και NMR.

Ικανότητες

- Ικανότητα εφαρμογής των γνώσεων που αποκόμισαν οι φοιτητές στην αντιμετώπιση προβλημάτων που άπτονται της Υπολογιστικής Χημείας.
- Ικανότητα να ερμηνεύουν δεδομένα υπολογισμών και να τα συσχετίζουν με δομικές, δονητικές, ηλεκτρικές, και άλλες ιδιότητες μοριακών, περιοδικής συμμετρίας, νανοδομών ή άμορφων χημικών συστημάτων.
- Ικανότητα στη χρήση υπολογιστικών πακέτων για των υπολογισμό ιδιοτήτων χημικών συστημάτων.
- Ικανότητα να προβλέπουν και να αναλύουν φάσματα που αντιστοιχούν σε ενεργειακές μεταβάσεις (UV/Vis, IR, Raman, NMR).

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

Παράγωγή νέων ερευνητικών ιδεών

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...

.....

Οι γενικές ικανότητες που θα πρέπει να έχει αποκτήσει ο φοιτητής και στις οποίες αποσκοπεί το μάθημα είναι:

- Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με τη χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών.
- Αυτόνομη εργασία.
- Ομαδική εργασία.
- Ικανότητα εφαρμογής γνώσεων στην επίλυση προβλημάτων.
- Παραγωγή νέων ερευνητικών ιδεών.
- Εργασία σε διεπιστημονικό περιβάλλον.
- Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης.
- Λήψη αποφάσεων.

(3) ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

Υπολογιστικοί μέθοδοι που βασίζονται στη θεωρία των μοριακών τροχιακών (ab-initio) και στο συναρτησιακό ηλεκτρονιακής πυκνότητας (DFT) και η εφαρμογή τους σε προβλήματα που αφορούν υλικά με τεχνολογικές εφαρμογές. Περιγράφονται υπολογιστικά πακέτα (Gaussian, MOPAC, κ.α.) και αναλύονται οι δυνατότητές τους. Εξάσκηση στον υπολογιστή πάνω σε προβλήματα υπολογισμού ενέργειας και βελτιστοποίησης της δομής μοριακών συστημάτων και παρουσιάζονται τεχνικές μελέτης της τοπικής δομής συστημάτων που εκτείνονται σε μεγαλύτερη έκταση (κρυσταλλικά και άμορφα υλικά, επιφάνειες, νανοϋλικά, κ.α.). Μελετάται επίσης η επίδραση της παρουσίας διαλύτη, η αλληλεπίδραση (ισχυρή ή ασθενής) μεταξύ των μορίων, οι ηλεκτρικές ιδιότητες (διπολική ροπή, πολωσιμότητα, πολυπολικές ροπές), τα φορτία και η ηλεκτροστατική επιφάνεια, τα φάσματα απορρόφησης, δόνησης και NMR.

Τα παραπάνω συνδέονται με τα ερευνητικά projects (Διπλωματικές Εργασίες) των φοιτητών.

(4) ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ και ΜΑΘΗΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ - ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

<p>ΤΡΟΠΟΣ ΠΑΡΑΔΟΣΗΣ <i>Πρόσωπο με πρόσωπο, Εξ αποστάσεως εκπαίδευση κ.λπ.</i></p>	<p>Πρόσωπο με πρόσωπο</p>	
<p>ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ <i>Χρήση Τ.Π.Ε. στη Διδασκαλία, στην Εργαστηριακή Εκπαίδευση, στην Επικοινωνία με τους φοιτητές</i></p>	<p>Στη Διδασκαλία:</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Παρουσιάσεις με πολυμεσικό περιεχόμενο (power point) <p>Στην Επικοινωνία με τους φοιτητές:</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Υποστήριξη της μαθησιακής διαδικασίας μέσω της ηλεκτρονικής πλατφόρμας e-class (ανακοινώσεις, πληροφορίες, μηνύματα, έγγραφα, ομάδες χρηστών, κ.λπ.). ▪ Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο. 	
<p>ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ <i>Περιγράφονται αναλυτικά ο τρόπος και μέθοδοι διδασκαλίας.</i></p>	<p>Δραστηριότητα</p>	<p>Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου</p>

<p>Διαλέξεις, Σεμινάρια, Εργαστηριακή Άσκηση, Άσκηση Πεδίου, Μελέτη & ανάλυση βιβλιογραφίας, Φροντιστήριο, Πρακτική (Τοποθέτηση), Κλινική Άσκηση, Καλλιτεχνικό Εργαστήριο, Διαδραστική διδασκαλία, Εκπαιδευτικές επισκέψεις, Εκπόνηση μελέτης (project), Συγγραφή εργασίας / εργασιών, Καλλιτεχνική δημιουργία, κ.λπ.</p> <p>Αναγράφονται οι ώρες μελέτης του φοιτητή για κάθε μαθησιακή δραστηριότητα καθώς και οι ώρες μη καθοδηγούμενης μελέτης σύμφωνα με τις αρχές του ECTS</p>	Διαλέξεις	78
	Μη καθοδηγούμενη μελέτη	62
	Προετοιμασία και συγγραφή εργασιών	50
	Εβδομαδιαία μελέτη μαθήματος	20
	Προετοιμασία/εργασία πάνω σε projects	30
	Συναντήσεις εργασίας	10
	Σύνολο Μαθήματος	250
<p>ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΦΟΙΤΗΤΩΝ Περιγραφή της διαδικασίας αξιολόγησης</p> <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>Η αξιολόγηση των φοιτητών γίνεται στα Ελληνικά και περιλαμβάνει:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Πρακτική εξέταση σε υπολογιστή. • Εργασίες, projects. 	

(5) ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ-ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

<ul style="list-style-type: none"> • Introduction to Computational Chemistry, Second Edition, Frank Jensen, John Wiley & Sons Inc., ISBN-13: 978-0-470-01186-7. • Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems. David C. Young, Copyright (2001 John Wiley & Sons, Inc. ISBNs: 0-471-33368-9 (Hardback); 0-471-22065-5 (Electronic). • Essentials of Computational Chemistry, Theories and Models, Second Edition, Christopher J. Cramer, John Wiley & Sons Ltd, ISBN 0-470-09181-9.
