

MAS_364 Στοιχεία Μοριακής Φυσικής και Κβαντικής Χημείας

1. ΓΕΝΙΚΑ

ΣΧΟΛΗ	ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ		
ΤΜΗΜΑ	ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ		
ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΟ		
ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	MAS_364	ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	6 ^ο
ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	Στοιχεία Μοριακής Φυσικής και Κβαντικής Χημείας		
ΑΥΤΟΤΕΛΕΙΣ ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ	ΕΒΔΟΜΑΔΙΑΙΕΣ ΩΡΕΣ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ	ΠΙΣΤΩΤΙΚΕΣ ΜΟΝΑΔΕΣ	
	3	4	
ΤΥΠΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	Υποβάθρου		
ΠΡΟΑΠΑΙΤΟΥΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ:	Όχι		
ΓΛΩΣΣΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ και ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ:	Ελληνικά		
ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ ΠΡΟΣΦΕΡΕΤΑΙ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ERASMUS	Όχι		
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΣΕΛΙΔΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ (URL)	http://www.matersci.upatras.gr/el/courses/molphys-quantumchem		

2. ΜΑΘΗΣΙΑΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Μαθησιακά Αποτελέσματα
Μαθησιακά Αποτέλεσμα : Στόχος του μαθήματος είναι η εισαγωγή του μαθητή στα βασικά θέματα της μοριακής φυσικής και της κβαντικής χημείας, όπως: (α) προσεγγιστικές μέθοδοι στην κβαντική μηχανική (β) ατομική δομή (γ) μοριακή δομή (δ) μοριακή συμμετρία (ε) μοριακή φασματοσκοπία (στ) ηλεκτρικές και μαγνητικές ιδιότητες μορίων. <i>Το μάθημα σύμφωνα με το Ευρωπαϊκό Πλαίσιο Προσόντων Διά Βίου Μάθησης είναι επιπέδου 6 ως μάθημα πρώτου κύκλου σπουδών.</i>
Γενικές Ικανότητες
Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με τη χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών Προσαρμογή σε νέες καταστάσεις Αυτόνομη εργασία Ομαδική εργασία Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης

3. ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

<p>Ταυτόσημα σωματία, φερμιόνια και μποζόνια. Απαγορευτική και γενικευμένη αρχή του Pauli. Απλά συστήματα μη-αλληλοεπιδρώντων σωματιίων.</p> <p>Προσεγγιστικές Μέθοδοι: Χρονικά ανεξάρτητη θεωρία διαταραχών μη εκφυλισμένης στάθμης (1ης τάξης στην ενέργεια) και παραδείγματα σε μονοδιάστατα και τρισδιάστατα συστήματα και συστήματα 2 σωματιίων. Θεωρία μεταβολών και παραδείγματα σε μονοδιάστατα και τρισδιάστατα συστήματα και συστήματα 2 σωματιίων. Χρονικά εξαρτημένη θεωρία διαταραχών και εφαρμογή σε απλά παραδείγματα. Αλληλεπίδραση με το φως σε μονοηλεκτρονικό άτομο και κανόνες επιλογής.</p>
--

Ατομική Δομή: Φάσμα μονοηλεκτρονικών ιόντων. Αλληλεπίδραση spin-orbit και λεπτή δομή του φάσματος. Συμβολισμός ενεργειακών καταστάσεων. Άτομο του ηλίου. Πολυηλεκτρονικά άτομα. Κυματοσυναρτήσεις πολυηλεκτρονικών ατόμων. Αρχή εποικισμού και ηλεκτρονικές διαμορφώσεις. Κβαντική εξήγηση του περιοδικού πίνακα. Αλληλεπιδράσεις με μαγνητικό και ηλεκτρικό πεδίο (φαινόμενα Zeeman και Stark).
 Μοριακή Δομή: Προσέγγιση Born-Oppenheimer. Θεωρία μοριακών τροχιακών. Ιόν του μοριακού υδρογόνου. Διατομικά και πολυατομικά μόρια. Προσέγγιση Hückel και μελέτη παραδειγμάτων γραμμικών και κυκλικών μορίων.
 Συμμετρία: Δράσεις και στοιχεία συμμετρίας. Ταξινόμηση μορίων. Άμεσες συνέπειες συμμετρίας. Ομάδες αναπαράστασης και χαρακτήρες. Πίνακες χαρακτήρων και χρήση τους.
 Μοριακή Φασματοσκοπία: Περιστροφικό φάσμα. Φαινόμενο Raman. Δονητικό φάσμα. Δονητικό-περιστροφικό φάσμα. Ηλεκτρονική φασματοσκοπία. Αρχή Frank-Condon.

4. ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ και ΜΑΘΗΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ - ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

ΤΡΟΠΟΣ ΠΑΡΑΔΟΣΗΣ	Πρόσωπο με πρόσωπο	
ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ	Η διδασκαλία του μαθήματος γίνεται με την χρήση πίνακα όπου αναλύεται διεξοδικά η θεωρία και επιλύονται πολλά προβλήματα.	
ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ	<i>Δραστηριότητα</i>	<i>Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου</i>
	Διαλέξεις	39
	Μελέτη θεωρίας στο σπίτι	41
	Μελέτη και επίλυση ασκήσεων στο σπίτι	40
	Σύνολο Μαθήματος	120
ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΦΟΙΤΗΤΩΝ	Επίλυση Προβλημάτων στην τελική γραπτή εξέταση του μαθήματος	

5. ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- Μοριακή Κβαντική Μηχανική, P.W. Atkins
- Ο Χημικός Δεσμός, J. Murrell, S.A. Kettle, J.N. Tedder
- S. M. Blinder, Introduction to Quantum Mechanics in Chemistry, Materials Science, and Biology, Elsevier, 2004
- A. McQuarrie, Quantum Chemistry, University Science Books, 1991
- H. Haken and H. C. Wolf, Molecular Physics and Elements of Quantum Chemistry, Springer-Verlag, 2004
- J. D. Livingston, Electronic Properties of Engineering Materials, John Wiley & Sons, 1999