

ΥΠΟΔΕΙΓΜΑ Β5

ΠΕΡΙΓΡΑΜΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

(1) ΓΕΝΙΚΑ

ΣΧΟΛΗ	ΘΕΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ		
ΤΜΗΜΑ	ΧΗΜΕΙΑΣ		
ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΟ		
ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	ΧΗΜ-164	ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	7
ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	Υπολογιστική χημεία με εφαρμογές σε μόρια, υλικά και περιβάλλον II		
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 και εργαστηριακές ασκήσεις	4	6	
Προσθέστε σειρές αν χρειαστεί. Η οργάνωση διδασκαλίας και οι διδακτικές μέθοδοι που χρησιμοποιούνται περιγράφονται αναλυτικά στο (δ).			
ΤΥΠΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ <i>γενικού υποβάθρου, ειδικού υποβάθρου, ειδίκευσης γενικών γνώσεων, ανάπτυξης δεξιοτήτων</i>	Επιστημονικής Περιοχής Μάθημα Επιλογής		
ΠΡΟΑΠΑΙΤΟΥΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ:	Βασικές γνώσεις φυσικοχημείας, οργανικής χημείας και προγραμματισμού		
ΓΛΩΣΣΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ και ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ:	Ελληνική		
ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ ΠΡΟΣΦΕΡΕΤΑΙ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ERASMUS	ΟΧΙ		
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΣΕΛΙΔΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ (URL)	http://www.chemistry.uoc.gr/wordpress/σπουδές/προπτυχιακές-σπουδές/οδηγός-σπουδών/		

(2) ΜΑΘΗΣΙΑΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

<p>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.</p> <p>Συμβουλευτείτε το Παράρτημα Α</p> <ul style="list-style-type: none"> 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
<p>Σκοπός του μαθήματος είναι η μύηση του φοιτητή μέσα από συγκεκριμένες ασκήσεις σε υπολογιστικά προγράμματα για διάφορες χημικές εφαρμογές.</p> <p>Οι φοιτητές, μετά την επιτυχή ολοκλήρωση του μαθήματος</p> <ul style="list-style-type: none"> θα κατέχουν τις βασικές αρχές για αριθμητικούς υπολογισμούς μοριακής δυναμικής για υπολογισμούς από πρώτες αρχές (ab-initio) και με τη χρήση του πακέτου Gaussian

Διεργασία 4. Εσωτερική Αξιολόγηση
Αναμόρφωση του Προγράμματος Προπτυχιακών Σπουδών
Υπόδειγμα Β5 ΑΔΙΠ

- και για απλά περιβαλλοντικά προβλήματα

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...

.....

- Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με τη χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών
- Προσαρμογή σε νέες καταστάσεις
- Αυτόνομη εργασία
- Ομαδική εργασία

(3) ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

- Μοριακή Δυναμική : Υπολογισμός μοριακών θερμοδυναμικών ποσοτήτων όπως οι διαφορές ελεύθερης ενέργειας ενυδάτωσης ιόντων με μοριακές προσομοιώσεις. Εκπαίδευση στα προγράμματα Μοριακής Δυναμικής TINKER και του μοριακού γραφικού πακέτου VMD.
- Μόρια & Υλικά : Εισαγωγή σε μεθόδους υπολογισμών Από Πρώτες Αρχές (Ab-initio) και εφαρμογές σε Η/Υ με το πρόγραμμα Gaussian (Εισαγωγή στην θεωρία των Μοριακών Τροχιακών, Προσέγγιση Born-Oppenheimer, Θεωρία Hartree-Fock, Ανάπτυξη Μοριακών Τροχιακών σε Βασικές Συναρτήσεις)
- Περιβάλλον : Σύντομη επανάληψη της χρήσης fortran σε περιβάλλον linux και της χρήσης του editor vi. Εργαστηριακές ασκήσεις προγραμματισμού σε fortran του υπολογισμού χρόνου ζωής ενώσεων στο περιβάλλον, των σταθερών φωτοδιάσπασης ενώσεων στην ατμόσφαιρα, της ημερήσιας διακύμανσης των εκπομπών ενώσεων από την θάλασσα στην ατμόσφαιρα, των ταχυτήτων αντιδράσεων με τη χρήση προσεγγιστικών μεθόδων δομής-δραστικότητας.

**Διεργασία 4. Εσωτερική Αξιολόγηση
Αναμόρφωση του Προγράμματος Προπτυχιακών Σπουδών
Υπόδειγμα Β5 ΑΔΙΠ**

ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ και ΜΑΘΗΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ - ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

<p>ΤΡΟΠΟΣ ΠΑΡΑΔΟΣΗΣ Πρόσωπο με πρόσωπο, Εξ αποστάσεως εκπαίδευση κ.λπ.</p>	<p>Πρόσωπο με πρόσωπο</p>													
<p>ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ Χρήση Τ.Π.Ε. στη Διδασκαλία, στην Εργαστηριακή Εκπαίδευση, στην Επικοινωνία με τους φοιτητές</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο • Εργαστηριακή εκπαίδευση • Ιστοσελίδα τμήματος-Οδηγός σπουδών • Classweb 													
<p>ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ Περιγράφονται αναλυτικά ο τρόπος και μέθοδοι διδασκαλίας. 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. Αναγράφονται οι ώρες μελέτης του φοιτητή για κάθε μαθησιακή δραστηριότητα καθώς και οι ώρες μη καθοδηγούμενης μελέτης σύμφωνα με τις αρχές του ECTS</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th><i>Δραστηριότητα</i></th> <th><i>Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου</i></th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Διαλέξεις, εργαστηριακές ασκήσεις</td> <td>52</td> </tr> <tr> <td>Μελέτη εμπέδωσης</td> <td>50</td> </tr> <tr> <td>Εκπόνηση ατομικής εργασίας, Προφορική παρουσίαση της, εξέταση</td> <td>48</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>Σύνολο Μαθήματος</td> <td>150</td> </tr> </tbody> </table>	<i>Δραστηριότητα</i>	<i>Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου</i>	Διαλέξεις, εργαστηριακές ασκήσεις	52	Μελέτη εμπέδωσης	50	Εκπόνηση ατομικής εργασίας, Προφορική παρουσίαση της, εξέταση	48			Σύνολο Μαθήματος	150	
<i>Δραστηριότητα</i>	<i>Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου</i>													
Διαλέξεις, εργαστηριακές ασκήσεις	52													
Μελέτη εμπέδωσης	50													
Εκπόνηση ατομικής εργασίας, Προφορική παρουσίαση της, εξέταση	48													
Σύνολο Μαθήματος	150													
<p>ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΦΟΙΤΗΤΩΝ Περιγραφή της διαδικασίας αξιολόγησης Γλώσσα Αξιολόγησης, Μέθοδοι αξιολόγησης, Διαμορφωτική ή Συμπερασματική, Δοκιμασία Πολλαπλής Επιλογής, Ερωτήσεις Σύντομης Απάντησης, Ερωτήσεις Ανάπτυξης Δοκιμών, Επίλυση Προβλημάτων, Γραπτή Εργασία, Έκθεση / Αναφορά, Προφορική Εξέταση, Δημόσια Παρουσίαση, Εργαστηριακή Εργασία, Κλινική Εξέταση Ασθενούς, Καλλιτεχνική Ερμηνεία, Άλλη / Άλλες Αναφέρονται ρητά προσδιορισμένα κριτήρια αξιολόγησης και εάν και που είναι προσθάσιμα από τους φοιτητές.</p>	<p>Γλώσσα Ελληνική</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) Εργαστηριακές ασκήσεις κατά τη διάρκεια του εξαμήνου. 2) Στο τέλος της διδασκαλίας του μαθήματος και των εργαστηριακών ασκήσεων δίδεται μία υποχρεωτική ατομική εργασία, με στόχο αξιολόγηση του φοιτητή. Αυτή πρέπει να μετατραπεί σε αριθμητικό μοντέλο κατά τη διάρκεια της εργαστηριακής εξέτασης και να παρουσιαστεί κατόπιν στον διδάσκοντα. <p>Ο τελικός βαθμός του μαθήματος προκύπτει από:</p> <ul style="list-style-type: none"> • 50% από την βαθμολόγηση της «εξατομικευμένης» εργασίας • 50% από την βαθμολόγηση της επίδοσης του φοιτητή στις εργαστηριακές ασκήσεις κατά τη διάρκεια του μαθήματος. 													

(4) ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ-ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- Προτεινόμενη Βιβλιογραφία:

Σημειώσεις του μαθήματος από τους διδάσκοντες και σημειώσεις από το διαδίκτυο
<http://www.linux.org/forums/beginner-tutorials.53/>
<http://www.yolinux.com/TUTORIALS/LinuxTutorialHardware.html>

Διεργασία 4. Εσωτερική Αξιολόγηση
Αναμόρφωση του Προγράμματος Προπτυχιακών Σπουδών
Υπόδειγμα Β5 ΑΔΙΠ

http://www.pcc.qub.ac.uk/tec/courses/f90/stu-notes/F90_notesMIF_2.html

- Συναφή επιστημονικά περιοδικά:

COURSE OUTLINE

(1) GENERAL

SCHOOL	SCHOOL OF SCIENCE AND ENGINEERING		
ACADEMIC UNIT	CHEMISTRY DEPARTMENT		
LEVEL OF STUDIES	UNDERGRADUATE		
COURSE CODE	CHEM-164	SEMESTER	8
COURSE TITLE	Computational Chemistry with applications to molecules, materials and the environment –II		
INDEPENDENT TEACHING ACTIVITIES <i>if credits are awarded for separate components of the course, e.g. lectures, laboratory exercises, etc. If the credits are awarded for the whole of the course, give the weekly teaching hours and the total credits</i>	WEEKLY TEACHING HOURS	CREDITS	
Lectures and laboratory exercises	4	6	
<i>Add rows if necessary. The organisation of teaching and the teaching methods used are described in detail at (d).</i>			
COURSE TYPE <i>general background, special background, specialised general knowledge, skills development</i>	Special background Selective course		
PREREQUISITE COURSES:	Basic knowledge of physical and organic chemistry and of numerical modeling		
LANGUAGE OF INSTRUCTION and EXAMINATIONS:	Greek		
IS THE COURSE OFFERED TO ERASMUS STUDENTS	NO		
COURSE WEBSITE (URL)	http://www.chemistry.uoc.gr/wordpress/σπουδές/προπτυχιακές-σπουδές/οδηγός-σπουδών/		

(2) LEARNING OUTCOMES

Learning outcomes

The course learning outcomes, specific knowledge, skills and competences of an appropriate level, which the students will acquire with the successful completion of the course are described.

Consult Appendix A

- *Description of the level of learning outcomes for each qualifications cycle, according to the Qualifications Framework of the European Higher Education Area*
- *Descriptors for Levels 6, 7 & 8 of the European Qualifications Framework for Lifelong Learning and Appendix B*
- *Guidelines for writing Learning Outcomes*

The course aims to introduce the student to numerical programming for carrying out physical-chemical calculations of varying complexity and application.

Students, after successfully completing the course, will possess the basic principles for numerical modeling of molecular dynamics, ab-initio and Gaussian calculations and for simple environmental problems.

General Competences

Taking into consideration the general competences that the degree-holder must acquire (as these appear in the Diploma Supplement and appear below), at which of the following does the course aim?

Search for, analysis and synthesis of data and information, with the use of the necessary technology

Adapting to new situations

Decision-making

Working independently

Team work

Working in an international environment

Working in an interdisciplinary environment

Production of new research ideas

Project planning and management

Respect for difference and multiculturalism

Respect for the natural environment

Showing social, professional and ethical responsibility and

sensitivity to gender issues

Criticism and self-criticism

Production of free, creative and inductive thinking

.....

Others...

.....

- Search, analyze and synthesize data and information, using the necessary technologies
- Adapt to new situations
- Autonomous work
- Teamwork

(3) SYLLABUS

1. Molecular Dynamics : Computation of free energy differences of ions in water solution via molecular simulations. Introduction to Molecular Dynamics programs of TINKER and molecular graphics via VMD.
2. Molecules & Materials : Introduction to Ab-initio methods and applications with the program package Gaussian (Molecular Orbital theory, Born-Oppenheimer approximation, Hartree-Fock theory, basis sets)
3. Environment : Short revision of the main commands of fortran and its use in a linux environment and of the editor vi. Numerical programming exercises (hands-on) in fortran for the computation of the lifetimes of compounds in the environment, the photodissociation rates in the atmosphere, the rate constant of reactions using structure-activity relationship.

(4) TEACHING and LEARNING METHODS - EVALUATION

DELIVERY <i>Face-to-face, Distance learning, etc.</i>	Face-to-face	
USE OF INFORMATION AND COMMUNICATIONS TECHNOLOGY <i>Use of ICT in teaching, laboratory education, communication with students</i>	<ul style="list-style-type: none"> • Electronic mail • Departmental website-Study guide • Laboratory education • Classweb 	
TEACHING METHODS <i>The manner and methods of teaching are described in detail. Lectures, seminars, laboratory practice, fieldwork, study and analysis of bibliography, tutorials, placements, clinical practice, art workshop, interactive teaching, educational visits, project, essay writing, artistic creativity, etc. The student's study hours for each learning activity are given as well as the hours of non-directed study according to the principles of the ECTS</i>	Activity	Semester workload
	Lectures, laboratory practice	52
	Study	50
	Course personal Assignment, Oral presentation of results	48
	Course total	150
STUDENT PERFORMANCE EVALUATION <i>Description of the evaluation procedure Language of evaluation, methods of evaluation, summative or conclusive, multiple choice questionnaires, short-answer questions, open-ended questions, problem solving, written work, essay/report, oral examination, public presentation, laboratory work, clinical examination of patient, art interpretation, other Specifically-defined evaluation criteria are given, and if and where they are accessible to students.</i>	<p>Student's performance is evaluated based on</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) Programming exercises during the semester 2) A programming project and examination during its presentation to the teacher at the end of the semester. The exercise will lead to a numerical model that will be written during the examination in the computer laboratory and will be presented to the teacher. <p>The final grade of the course comes by</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) 50% from the grade of the personalized project and 2) 50% the performance of the student in laboratory exercises during the course. 	

(5) ATTACHED BIBLIOGRAPHY

<p>- Suggested bibliography:</p> <p>Summary notes by the teachers and e-books on linux and fortran available on the internet. http://www.linux.org/forums/beginner-tutorials.53/ http://www.yolinux.com/TUTORIALS/LinuxTutorialHardware.html http://www.pcc.qub.ac.uk/tec/courses/f90/stu-notes/F90_notesMIF_2.html</p> <p>- Related academic journals:</p>
--