

COURSE OUTLINE

(1) GENERAL

SCHOOL	SCHOOL OF SCIENCES		
ACADEMIC UNIT	PHYSICS DEPARTMENT		
LEVEL OF STUDIES	UNDERGRADUATE		
COURSE CODE	202	SEMESTER	6,8
COURSE TITLE	MOLECULAR PHYSICS		
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	
	4	5	
<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 _____		
PREREQUISITE COURSES:			
LANGUAGE OF INSTRUCTION and EXAMINATIONS:	Greek		
IS THE COURSE OFFERED TO ERASMUS STUDENTS	Yes (Greek)		
COURSE WEBSITE (URL)	The associated webpage in the E-course platform of the University of Ioannina		

(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 aim of this course is to provide students with the knowledge of fundamental aspects of Molecular Physics and the interaction of molecules with electromagnetic radiation. Introducing the appropriate approximations (Born- Oppenheimer), the electronic motion, the eigenstates and the corresponding wave functions (molecular orbitals) are discussed in terms of quantum mechanics. In particular, the nature of the chemical bond is described in a comparative way in terms of the Valence Bond & the Molecular Orbital quantum Theories. The module starts with a detailed description of the molecular bond starting from the simplest case of H_2^+ towards molecular systems of increasing complexity: diatomic, polyatomic ones and the use of hybrid orbitals for the latter case. Similarly, the nuclear motion is described by taking into account the rigid rotator and the non-rotating harmonic oscillator approximations, and the corresponding vibrational and rotational states (energies and eigenfunctions) are introduced. Special emphasis is placed on the interaction of molecules with photons in different wavelength regions (from UV to Visible to mid-infrared to microwaves), the selection rules and the information on the Molecular structure, which can be drawn by using the associated Spectroscopic techniques.

Upon the successful completion of the course the student:

- Should have a consolidated knowledge for the order of magnitude for a series of fundamental quantities in the field of Molecular Physics: size, bond strength, the energy of the electronic-vibrational-rotational states, the corresponding timescales of electronic and nuclear motion.
- He/She will be able to apply the Variation Theory and the Molecular Orbital Theory to calculate the bond dissociation energy, the equilibrium bond length and the distribution of the electronic charge for the case of H_2^+ .
- He/She should be able to use apply the Molecular orbital Theory on the description of the electronic structure of diatomic molecules: the bonding or non-bonding character of the molecular states, their symmetry, the corresponding molecular term symbol.
- He/She should be aware of the dependence of nuclear motion on the characteristics of the molecular orbitals (qualitative features of electronic distribution, shape of the Morse potential) and the physical mechanisms leading to the mixing of vibrational and rotational spectra.
- He/She should be able to use Molecular Spectra (Absorption-Emission-Raman) and search for the required information in the available literature to draw qualitative conclusions about the properties of the molecular sample.

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...
.....

Team work, Working independently, Decision-making.

(3) SYLLABUS

- Molecular properties: Shape, size, molecular bond, dipole moment, polarizability.
- Molecular symmetry. The Schrödinger equation-Born Oppenheimer approximation, electronic states, Molecular orbitals, Morse Potential.
- Nuclear motion – vibrational & rotational states, examples of molecules and the corresponding timescales, energies, absorption wavelengths
 - Rotational motion _ states – transitions – spectra – isotopic labeling
 - Vibrational motion _ states – transitions – spectra
 - Interaction of Vibrational & rotational motion, molecular states of mixed character – the molecular vibrational/rotational spectra.
- Electronic transitions - Franck-Condon factors, selection rules, emission (Fluorescence, Phosphorescence, non-radiative relaxation, bond dissociation, Multiphoton absorption and ionization.

(4) TEACHING and LEARNING METHODS - EVALUATION

<p style="text-align: center;">DELIVERY</p> <p style="text-align: center;"><i>Face-to-face, Distance learning, etc.</i></p>	Face-to-face	
<p style="text-align: center;">USE OF INFORMATION AND COMMUNICATIONS TECHNOLOGY</p> <p style="text-align: center;"><i>Use of ICT in teaching, laboratory education, communication with students</i></p>	The ppt presentations and the notes used by the tutor during the lectures are available in the Molecular Physics webpage in the E-course online platform of the University of Ioannina	
<p style="text-align: center;">TEACHING METHODS</p> <p><i>The manner and methods of teaching are described in detail.</i></p> <p><i>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.</i></p> <p><i>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></p>	Activity	Semester workload
	Lectures (Theory)	39
	tuition	13
	Study & analysis of bibliography	55
	Essay writing	15
	Exams	3
	Course total	125
<p style="text-align: center;">STUDENT PERFORMANCE EVALUATION</p> <p><i>Description of the evaluation procedure</i></p> <p><i>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</i></p> <p><i>Specifically-defined evaluation criteria are given, and if and where they are accessible to students.</i></p>	Written Exam (100%).	

(5) ATTACHED BIBLIOGRAPHY

- Suggested bibliography:
- *Physical Chemistry, Peter Atkins, J. De Paula (2014)*
 - *Molecular quantum mechanics, Peter Atkins, Rional Freidman (Oxford University Press)*

3. Περιγράμματα Μαθημάτων Προγράμματος Σπουδών

Στην ενότητα αυτή παρουσιάζονται τα συνοπτικά περιγράμματα των μαθημάτων που διδάσκονται στο Πρόγραμμα Σπουδών, είτε αυτά προσφέρονται από το τμήμα που είναι υπεύθυνο για το ΠΣ ή από άλλα τμήματα. Το περίγραμμα κάθε μαθήματος καθορίζει τη μορφή, το σκοπό, τα μαθησιακά αποτελέσματα και το περιεχόμενο του μαθήματος και προδιαγράφει τον τρόπο υλοποίησης της διδακτικής και μαθησιακής διαδικασίας και τον τρόπο αξιολόγησης των φοιτητών. Το περίγραμμα του μαθήματος αποτελεί τη βάση πάνω στην οποία ο διδάσκων του μαθήματος αναπτύσσει τον τρόπο διδασκαλίας του έτσι ώστε ανεξαρτήτως του διδάσκοντος ή των διδασκόντων να πληρούνται οι βασικές προδιαγραφές και να επιτυγχάνεται η επίτευξη των μαθησιακών αποτελεσμάτων.. (δείτε και Παράρτημα Γ)

Το περίγραμμα κάθε μαθήματος περιλαμβάνει τις πληροφορίες όπως στο ενδεικτικό έντυπο που ακολουθεί (Παραδείγματα Περιγραμμάτων βρίσκονται αναρτημένα στον ιστότοπο της ΑΔΙΠ):

ΠΕΡΙΓΡΑΜΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

(1) ΓΕΝΙΚΑ

ΣΧΟΛΗ	ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ		
ΤΜΗΜΑ	ΦΥΣΙΚΗΣ		
ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΟ		
ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	202	ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	6,8
ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	ΜΟΡΙΑΚΗ ΦΥΣΙΚΗ		
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	
	4	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>	Ειδίκευσης γενικών γνώσεων		
ΠΡΟΑΠΑΙΤΟΥΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ:			
ΓΛΩΣΣΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ και ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ:	Ελληνική		
ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ ΠΡΟΣΦΕΡΕΤΑΙ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ERASMUS			
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΣΕΛΙΔΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ (URL)	http://www1.physics.uoi.gr/atomol/index_files/Page3239.htm		

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 παρέχει στο φοιτητή γνώσεις σχετικά με τη δομή των μορίων και την καταγραφή και ανάλυση των μοριακών φασμάτων. Μετά την επιτυχή ολοκλήρωση του μαθήματος ο φοιτητής /τρια:

- Θα έχει εμπεδώσει την τάξη μεγέθους για χαρακτηριστικές φυσικές ποσότητες σχετικές με τη μοριακή δομή: το μέγεθος των μορίων, τις ενεργειακές αποστάσεις των ηλεκτρονιακών, δονητικών, περιστροφικών καταστάσεων και τις αντίστοιχες χρονικές κλίμακες κίνησης, την ενέργεια δέσμωσης των μοριακών δεσμών.
- Θα είναι σε θέση να εφαρμόσει τη θεωρία μεταβολών και τη θεωρία μοριακών τροχιακών για τον προσεγγιστικό υπολογισμό της ενέργειας δέσμωσης και τη μορφή της κατανομής του ηλεκτρονιακού φορτίου για την περίπτωση του ιόντος μοριακού υδρογόνου (υπό την προσέγγιση Born – Oppenheimer).
- Θα έχει εμπεδώσει τη μεθοδολογία μελέτης πολυπλοκότερων μοριακών συστημάτων (ξεκινώντας από το μόριο H₂) και θα βρίσκεται σε θέση να προτείνει την ηλεκτρονιακή μοριακή διάταξη (ονοματολογία, συμμετρία) και τη σταθερότητα των αντίστοιχων μοριακών καταστάσεων (δεσμικά – αντιδεσμικά μοριακά τροχιακά- τάξη δεσμού- υβριδισμός).
- Θα έχει κατανοήσει την επίδραση της μορφής του μοριακού τροχιακού (καμπύλες δυναμικής ενέργειας – δεσμικό & αντιδεσμικό τροχιακό) στην κίνηση των πυρήνων (δονητική – περιστροφική), καθώς και τα φυσικά αίτια της αλληλεπίδρασης για τα δύο είδη κίνησης (φυγόκεντρα παραμόρφωση, αναρμονικότητα).
- Θα είναι σε θέση, χρησιμοποιώντας φασματοσκοπικά δεδομένα (απορρόφησης- εκπομπής- σκέδασης Raman), να εξάγει ποιοτικά συμπεράσματα για τη δομή των μορίων (τα άτομα από τα οποία αποτελούνται, την τάξη δεσμού), καθώς και τον υπολογισμό μεγεθών σχετικών με τη γεωμετρία των αντίστοιχων καταστάσεων (“μήκος” δεσμού -σχετική γωνία μεταξύ των επιμέρους μοριακών δεσμών).

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...

.....

Αυτόνομη εργασία

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

Λήψη αποφάσεων

(2) ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

<ul style="list-style-type: none"> • Γενικά χαρακτηριστικά Μορίων _ Σχήμα, Μέγεθος, Μοριακός δεσμός, Διπολική ροπή, Πολωσιμότητα. • Στοιχεία μοριακής συμμετρίας_ Θεωρία Ομάδων σημείου. Κβαντική περιγραφή μοριακού συστήματος _ Προσέγγιση Born_Oppenheimer-Ηλεκτρονικές καταστάσεις _ Προσέγγιση μοριακών τροχιακών _ Καμπύλες δυναμικής ενέργειας. • Κίνηση πυρήνων: ταλαντωτικές και περιστροφικές καταστάσεις _ Ενέργεια μοριακού συστήματος- Δυναμικό Morse. <ul style="list-style-type: none"> - Περιστροφική κίνηση _ Είδη περιστροφών- Μεταβάσεις _ Κανόνες επιλογής _ Περιστροφικά φάσματα - Δονητική κίνηση _ Μεταβάσεις κανόνες επιλογής _ Δονητικά Φάσματα - Αλληλεπίδραση δονητικών _ περιστροφικών καταστάσεων, δονητικο-περιστροφικές καταστάσεις - Φασματοσκοπία Raman. • Ηλεκτρονικές μεταβάσεις _ Συντελεστές Franck- Condon, κανόνες επιλογής. Ακτινοβολητική Αποδιέγερση (Φθορισμός- φωσφορισμός) _ μη ακτινοβολητική αποδιέγερση. Ιονισμός – Μοριακή Διάσπαση, Πολυφωτονικές συντονιστικές και μη συντονιστικές διαδικασίες διέγερσης, Πολυφωτονικός μοριακός ιονισμός.
--

(3) ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ και ΜΑΘΗΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ - ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

ΤΡΟΠΟΣ ΠΑΡΑΔΟΣΗΣ <i>Πρόσωπο με πρόσωπο, Εξ αποστάσεως εκπαίδευση κ.λπ.</i>	Πρόσωπο με πρόσωπο διδασκαλία	
ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ <i>Χρήση Τ.Π.Ε. στη Διδασκαλία, στην Εργαστηριακή Εκπαίδευση, στην Επικοινωνία με τους φοιτητές</i>	Χρησιμοποιείται ιστοσελίδα του εργαστηρίου Ατομικής και Μοριακής Φυσικής: http://www1.physics.uoi.gr/atomol/index_files/Page3239.htm για τη διάθεση σημειώσεων και οπτικού υλικού/διαφανειών που χρησιμοποιούνται στις διαλέξεις, καθώς και για την ανάρτηση ανακοινώσεων.	
ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ <i>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.</i> <i>Αναγράφονται οι ώρες μελέτης του φοιτητή για κάθε μαθησιακή δραστηριότητα καθώς και οι ώρες μη καθοδηγούμενης μελέτης σύμφωνα με τις αρχές του ECTS</i>	Δραστηριότητα	Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου
	Διαλέξεις (Θεωρία)	39
	Φροντιστήριο	13
	Μελέτη βιβλιογραφίας	55
	Μη καθοδηγούμενη μελέτη	15
	Γραπτές εξετάσεις	3
	Σύνολο Μαθήματος	125
ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΦΟΙΤΗΤΩΝ <i>Περιγραφή της διαδικασίας αξιολόγησης</i> <i>Γλώσσα Αξιολόγησης, Μέθοδοι αξιολόγησης, Διαμορφωτική ή Συμπερασματική, Δοκιμασία Πολλαπλής Επιλογής, Ερωτήσεις Σύντομης Απάντησης, Ερωτήσεις Ανάπτυξης Δοκιμίων, Επίλυση</i>	Γραπτές Εξετάσεις στο τέλος του μαθήματος οι οποίες αφορούν στην κατανόηση της θεωρίας και την επίλυση προβλημάτων.	

<p>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>	
--	--

(4) ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ-ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- Φυσικοχημεία, Peter Atkins, J. De Paula, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης (2014).
- Molecular quantum mechanics, Peter Atkins, Ronald Friedman (Oxford University Press).