

**Μάθημα:** ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ ΚΑΙ ΕΡΓΑΛΕΙΑ ΟΠΤΙΚΟΠΟΙΗΣΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΟΜΗΣ, ΧΗΜΙΚΩΝ ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ ΚΑΙ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ (B εξάμηνο).

**Περιεχόμενο του μαθήματος:**

Τα επίπεδα των αναπαραστάσεων στη Χημεία. Επιστημονικά και νοητικά μοντέλα. Στατικές και δυναμικές αναπαραστάσεις. Δισδιάστατες διαγραμματικές και τρισδιάστατες αναπαραστάσεις της μοριακής δομής και εργαλεία δόμησης τους. Οπτικοποίηση βιομορίων. Οπτικοποίηση δεδομένων σε δύο και τρεις διαστάσεις. Υψομετρικοί χάρτες και ισομετρικές επιφάνειες. Μεθοδολογία οπτικοποίησης ατομικών τροχιακών. Οπτικοποίηση μοριακών τροχιακών, ηλεκτρονιακής πυκνότητας και ηλεκτροστατικού δυναμικού, κ.α. Ενσωμάτωση αλληλεπιδραστικών μοριακών μοντέλων και οπτικοποιήσεων χημικών ιδιοτήτων και δεδομένων σε εκπαιδευτικές ιστοσελίδες.