

ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ Ι (XHM-048)

ΜΟΡΙΑΚΗ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ

Διδάσκων: Δημήτριος Άγγλος

τηλ. +30-2810-545072

E-MAIL: anglos@uoc.gr

1^η Εισαγωγική Διάλεξη

Τρίτη 24/09/2024

09:00 – 11:00

Αμφιθέατρο Α1

Διαλέξεις: Τρίτη, Πέμπτη 09:00 – 11:00

Φροντιστήρια: Τετάρτη 17:00 – 18:00 (κατόπιν ανακοίνωσης)

Ώρες γραφείου (Γ 214): Πέμπτη 12:00 – 14:00 ή κατόπιν επικοινωνίας με e-mail

Open e-class: <http://www.chemistry.uoc.gr/eclass/courses/CHEM-UNDER123/>

Προτεινόμενη Βιβλιογραφία (Κλειστή Βιβλιοθήκη)

1. [AtΦX] P.W. Atkins, J. de Paula, J. Keeler 'Φυσικοχημεία' (Πανεπ. Εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο 2020)

[AtΦX-2014] P.W. Atkins, J. de Paula, 'Φυσικοχημεία' (Πανεπ. Εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο 2014)

2. [CT] R. Chang, J.W. Thoman Jr, 'Φυσικοχημεία' (Εκδόσεις Π. Χ. Πασχαλίδης, Λευκωσία, 2021)

3. [TR] Σ. Τραχανάς, 'Κβαντομηχανική Ι' (Πανεπ. Εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο 2021)

4. [ER] T. Engel, P. Reid, 'Physical Chemistry' (Pearson Education Inc. San Francisco 2010)

5. [HB] D.C. Harris, M.D. Bertolucci, 'Symmetry and Spectroscopy' (Dover, NY 1978)

6. [HO] J.M. Hollas, 'Modern Spectroscopy' (John-Wiley & Sons, NY 1996)

7. [AdP] P.W. Atkins, J. de Paula, J. Keeler 'Physical Chemistry' (Oxford Univ. Press, Oxford 2018)

8. [BMC] C. N. Banwell, E.M. McCash, 'Fundamentals of Molecular Spectroscopy' (McGraw Hill, 1999)

9. [NT] Φ. Νταής, 'Φασματοσκοπία' (Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο, Πάτρα 2001)

10. [SI] Μ. Π. Σιγάλας, Ν. Δ. Χαριστός, Λ. Δ. Αντώνογλου, 'Μοριακή Συμμετρία και Θεωρία Ομάδων, Θεωρία και Εφαρμογές' (ΣΕΑΒ 2016).

<https://www.openbook.gr/moriaki-symmetria-kai-theoria-omadwn/>

Συνοπτικά το περιεχόμενο του μαθήματος

Διδακτέα Ύλη ανά Εβδομάδα

1. Εισαγωγικά περί φασματοσκοπίας
2. Αξιώματα Κβαντικής Μηχανικής
3. Λύσεις και εφαρμογές της εξίσωσης Schrödinger
4. Πολυ-ηλεκτρονικά άτομα. Δομή και φασματοσκοπία (σε συνδυασμό με το εργαστήριο)
5. Περιστροφική φασματοσκοπία
6. Δονητική φασματοσκοπία
7. Φασματοσκοπία Raman
8. Μοριακή συμμετρία, Θεωρία ομάδων
9. Χημικός δεσμός. Μοριακά τροχιακά. [Προσεγγιστικές / Υπολογιστικές Μέθοδοι]
10. Ηλεκτρονική δομή μορίων. Συμμετρία μοριακών τροχιακών.
11. Ηλεκτρονική φασματοσκοπία μορίων (διατομικά)
12. Ηλεκτρονική φασματοσκοπία μορίων (πολυ-ατομικά)
13. Φασματοσκοπία φωτοηλεκτρονίων. Τεχνικές Λέιζερ

Το περιεχόμενο του μαθήματος συνδέεται άρρηκτα, συμπληρώνει και συμπληρώνεται από τα πειράματα, που πραγματοποιούνται στο πλαίσιο του Εργαστηρίου Φυσικοχημείας-Ι (XHM-311)

Εξέταση - Βαθμολόγηση

Δύο (2) Διαγωνίσματα Προόδου (ερωτήσεων πολλαπλής επιλογής) Αυτοαξιολόγησης (δεν υπολογίζονται στον τελικό βαθμό)

Τελική γραπτή εξέταση (≥5)

[Επιλογή προς απάντηση 5 από σύνολο 6 θεμάτων. Με την ολοκλήρωση του εξαμήνου θα ανακοινωθούν λεπτομέρειες για το διαγώνισμα και την τυπική δομή των θεμάτων].

Περιεχόμενο Διαλέξεων - Ενότητες στα συγγράμματα

Ενότητα	Κεφάλαια στα συγγράμματα
Εισαγωγή στο μάθημα. Περιγραφή, στόχοι, συγγράμματα, αξιολόγηση	
Ανασκόπηση βασικών εννοιών Κβαντικής Μηχανικής Τελεστές. Αξιώματα Κβαντικής Μηχανικής. Εξίσωση Schrödinger. Λύσεις και εφαρμογές της εξίσωσης Schrödinger. Σύντομη επανάληψη στα βασικά προβλήματα (φρέαρ δυναμικού, σωματίο σε περιφέρεια κύκλου, επιφάνεια σφαίρας). Κβάντωση ενέργειας, κβάντωση στροφορμής. Επανάληψη στο άτομο του H. Ενεργειακά επίπεδα. Ατομικά τροχιακά.	ΑτΦΧ Κεφ. 7, 8 TR Κεφ. 5, 9
Εισαγωγικά περί φασματοσκοπίας Τι είναι φάσμα – Γενικά. Μορφή (άξονες, μονάδες κλπ). Παραδείγματα. Νόμος Beer-Lambert, Σημασία ε, κβαντομηχανική ερμηνεία. Συντελεστές Einstein. Φασματικές γραμμές. Διαπλάτυνση (φυσική, Doppler).	ΑτΦΧ- Κεφ. 11Α TR Κεφ. 15
Πολυ-ηλεκτρονιακά άτομα. Ατομική δομή. Ατομική φασματοσκοπία Το άτομο του Ηλίου και πολύ-ε άτομα. Αρχή δόμησης. Προάσπιση. Ποιοτική αναφορά στην προσέγγιση Hartree-Fock SCF. Κυματοσυναρτήσεις πολύ-ε ατόμων. Αλληλεπίδραση τροχιακής στροφορμής-spin. Φασματοσκοπικοί όροι. Ατομικές μεταβάσεις. Κανόνες επιλογής. Παραδείγματα. Φασματοσκοπικοί όροι. Ατομικές μεταβάσεις. Ατομικά φάσματα. Φασματοσκοπία φωτοηλεκτρονίων (ατομικά τροχιακά εσωτερικών στιβάδων).	ΑτΦΧ Κεφ. 8 TR Κεφ. 8, 9, 10, 11 EG Κεφ. 8
Εισαγωγή στη Μοριακή Δομή Διατομικά μόρια. Προσέγγιση Born-Oppenheimer	ΑτΦΧ Κεφ. 9 σελ. 345
Περιστροφική φασματοσκοπία Πρότυπο στροφέα. Ενεργειακά επίπεδα. Μεταβάσεις και κανόνες επιλογής. Μελέτη, κατανόηση, και πρόβλεψη περιστροφικών φασμάτων	ΑτΦΧ Κεφ. 11B (εκτός 11B.4)
Δονητική φασματοσκοπία Αρμονικός ταλαντωτής. Ενεργειακές καταστάσεις. Κυματοσυναρτήσεις. Δονητική φασματοσκοπία. Κανόνες επιλογής. Διπολική ροπή μετάβασης Αναρμονικός ταλαντωτής. Δυναμικό Morse. Δονητικά φάσματα. Υπερτόνοι. Δονητικο-περιστροφική φασματοσκοπία. Κλάδοι P, Q, R. Φασματοσκοπία Raman. Μεταβάσεις, Κανόνες επιλογής, Πολωσιμότητα. Κλασσική ερμηνεία φασματοσκοπίας Raman-IR. Περιστροφική φασματοσκοπία Raman. Εισαγωγή σε ταλαντώσεις πολύ-ατομικών μορίων.	ΑτΦΧ Κεφ. 7E ΑτΦΧ Κεφ. 11Γ TR Κεφ. 7 ΑτΦΧ Κεφ. 11B.3 ΑτΦΧ Κεφ. 11Δ TR- Κεφ. 7
Μοριακή συμμετρία. Θεωρία Ομάδων Στοιχεία και πράξεις μοριακής συμμετρίας. Θεωρία Ομάδων. Ομάδες συμμετρίας σημείου. Παραδείγματα. Γεωμετρικοί μετασχηματισμοί. Πίνακες χαρακτήρων. Συμμετρία και γεωμετρία ταλαντώσεων πολύ-ατομικών μορίων. Κανονικοί τρόποι ταλάντωσης. Φάσματα IR-Raman πολύ-ατομικών μορίων.	ΑτΦΧ Κεφ. 10 SI ΑτΦΧ Κεφ. 11E SI
Χημικός δεσμός. Μοριακά τροχιακά. Ηλεκτρονιακή δομή μορίων Μοριακά τροχιακά σ, π. Βασική ιδέα LCAO. Ηλεκτρονιακή δομή ομο-(ετερο-)πυρηνικών διατομικών Φασματοσκοπικοί όροι διατομικών. Ενεργειακές καταστάσεις. Η περίπτωση του O ₂ . Θεμελιώδης triplet. Ηλεκτρονιακή δομή πολυατομικών. Ενέργεια μοριακών τροχιακών. Συμμετρία μοριακών τροχιακών. SALC's. Παραδείγματα (H ₂ , O ₂ , H ₂ CO, H ₂ O, C ₂ H ₄ , C ₆ H ₆)	ΑτΦΧ Κεφ. 9
Ηλεκτρονιακή φασματοσκοπία μορίων Κανόνες επιλογής. Ηλεκτροδονητικές μεταβάσεις. Αρχή Franck-Condon. Φασματοσκοπικοί όροι πολυ-ατομικών με βάση τη συμμετρία των μοριακών τροχιακών. Ενεργειακές καταστάσεις. Διάγραμμα Jablonski. Κανόνες επιλογής με βάση τη συμμετρία. Απορρόφηση, Φθορισμός, Φωσφορισμός.	ΑτΦΧ Κεφ. 11ΣΤ, 11Ζ

Αντιστοίχιση θεμάτων ύλης Φυσικοχημείας στα συγγράμματα AtΦΧ, AtΦΧ-2014 και AtΦΧ-II

	‘Φυσικοχημεία’ (AtΦΧ)	‘Φυσικοχημεία’ (AtΦΧ-2014)	‘Φυσικοχημεία II’ (AtΦΧ-II)
Γενικά περί μοριακής φασματοσκοπίας Εξαναγκασμένες και αυθόρμητες διεργασίες Διαπλάτυνση	Κεφ. 11Α	Κεφ. 12.1, 12.2, E12.1, Κεφ. 13.1 Περαιτέρω πληροφ. 12.1 (εκτός 12.1γ), 12.2 Κεφ. 13.4(α) Κεφ. 9.6	Κεφ. 18.1 (εκτός 18.1γ), 18.2, 18.3
Ανασκόπηση Κβαντικής Μηχανικής Λύσεις, εφαρμογές της εξίσωσης Schrödinger	Κεφ. 7	Κεφ. 7, Κεφ. 8	Κεφ. 13, Κεφ. 14
Ηλεκτρονική Δομή Ατόμων Ατομική φασματοσκοπία	Κεφ. 8	Κεφ. 9	Κεφ. 15 (εκτός 15.9) Παραρτήματα ΣΤ, Ζ, Η
Μοριακή Δομή, Μοριακά Τροχιακά	Κεφ. 9 (εκτός 9Ε)	Born-Oppenheimer, Κεφ. 10.1 Θεωρία ΜΤ, Κεφ. 10.3, 10.4, 10.5(α)	Born-Oppenheimer, Κεφ. 16.1, 16.2 Θεωρία ΜΤ, Κεφ. 16.4, 16.5, 16.6, 16.7(α)
Μοριακή συμμετρία - Θεωρία ομάδων	Κεφ. 10	Κεφ. 11	Κεφ. 17
Περιστροφική φασματοσκοπία διατομικών	Κεφ. 11Β (εκτός 11Β.4)	Κεφ. 12.3 - 12.6, εκτός 12.4(δ)	Αμιγώς περιστροφικά φάσματα Κεφ. 18.4 - 18.6, εκτός 18.4(δ)
Δονητική (-περιστροφική) φασματοσκοπία (IR, Raman)	Κεφ. 11Γ, 11Δ, 11Ε	Κεφ. 12.8 - 12.15, μέχρι πριν το 12.15(α), 12.16	Κεφ. 18.8 - 18.15(α, γ)
Ηλεκτρονική φασματοσκοπία	Κεφ. 11ΣΤ, 11Ζ.1	Κεφ. 13.2-13.6(α)	Κεφ. 19.1-19.5(α)