10.10.2025

ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ Ι (ΧΗΜ-048)

ΜΟΡΙΑΚΗ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ

Διδάσκων: Δημήτριος Άγγλος

τηλ. +30-2810-545072

E-MAIL: anglos@uoc.gr

1η Εισαγωγική Διάλεξη
Τρίτη 23/09/2025
09:00 – 11:00
Αμφιθέατρο Α1

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

Φροντιστήρια : Τρίτη 16:00 – 18:00 (κατόπιν ανακοίνωσης)

Ώρες γραφείου (Γ 214) : Τετάρτη 14:00 – 16:00 (κατόπιν επικοινωνίας με e-mail)

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

Προτεινόμενη Βιβλιογραφία (Κλειστή Βιβλιοθήκη)

1. **[AtΦΧ] P.W. Atkins, J. de Paula, J. Keeler '*Φυσικοχημεία*' (Πανεπ. Εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο 2025)**

   [AtΦΧ-2020] P.W. Atkins, J. de Paula, J. Keeler '*Φυσικοχημεία*' (Πανεπ. Εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο 2025)

   [AtΦΧ-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. [HB] D.C. Harris, M.D. Bertolucci, '*Symmetry and Spectroscopy*' (Dover, NY 1978)
5. [HO] J.M. Hollas, '*Modern Spectroscopy*' (John-Wiley & Sons, NY 1996)
6. [AdP] P.W. Atkins, J. de Paula, J. Keeler '*Physical Chemistry*' (Oxford Univ. Press, Oxford 2018)
7. [NT] Φ. Νταής, '*Φασματοσκοπία*' (Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο, Πάτρα 2001)
8. [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-thewria-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-ηλεκτρονιακά άτομα, Ατομική δομή
5. Ατομική φασματοσκοπία (σε συνδυασμό με το εργαστήριο). Φασματοσκοπία φωτοηλεκτρονίων.
6. Μοριακή δομή. Χημικός δεσμός. Μοριακά τροχιακά. [Προσεγγιστικές / Υπολογιστικές Μέθοδοι]
7. Περιστροφική φασματοσκοπία
8. Δονητική φασματοσκοπία
9. Φασματοσκοπία Raman
10. Μοριακή συμμετρία, Θεωρία ομάδων
11. Ηλεκτρονιακή δομή μορίων. Συμμετρία μοριακών τροχιακών.
12. Ηλεκτρονιακή φασματοσκοπία μορίων (διατομικά)
13. Ηλεκτρονιακή φασματοσκοπία μορίων (πολυ-ατομικά)

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

Εξέταση - Βαθμολόγηση

Δύο (2) Διαγωνίσματα Προόδου (ερωτήσεων πολλαπλής επιλογής)

Τελική γραπτή εξέταση (≥5)

[Επιλογή προς απάντηση 5 από σύνολο 6 ή 7 θεμάτων. Με την ολοκλήρωση του εξαμήνου θα ανακοινωθούν λεπτομέρειες για το διαγώνισμα και την τυπική δομή των θεμάτων].

10.10.2025

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, σωμάτιο σε περιφέρεια κύκλου, επιφάνεια σφαίρας). Κβάντωση ενέργειας, κβάντωση στροφορμής. Επανάληψη στο άτομο του Η. Ενεργειακά επίπεδα. Ατομικά τροχιακά.	**AtΦX** Κεφ. 7, 8 **TR** Κεφ. 5, 9 **CHEM³**..Κεφ. 3
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).	**AtΦX-** Κεφ. 11A **TR** Κεφ. 15
Πολυ-ηλεκτρονιακά άτομα. Ατομική δομή. Ατομική φασματοσκοπία Το άτομο του Ηλίου και πολύ-e άτομα. Αρχή δόμησης. Προάσπιση. Ποιοτική αναφορά στην προσέγγιση Hartree-Fock SCF. Κυματοσυναρτήσεις πολύ-e ατόμων. Αλληλεπίδραση τροχιακής στροφορμής-spin. Φασματοσκοπικοί όροι. Ατομικές μεταβάσεις. Κανόνες επιλογής. Παραδείγματα. Φασματοσκοπικοί όροι. Ατομικές μεταβάσεις. Ατομικά φάσματα. Φασματοσκοπία φωτοηλεκτρονίων (ατομικά τροχιακά εσωτερικών στιβάδων).	**AtΦX** Κεφ. 8 **TR** Κεφ. 8, 9, 10, 11 **EG** Κεφ. 8 **CHEM³**..Κεφ. 3
Εισαγωγή στη Μοριακή Δομή Διατομικά μόρια. Προσέγγιση Born-Oppenheimer	**AtΦX** Κεφ. 9 σελ. 343
Περιστροφική φασματοσκοπία Πρότυπο στροφέα. Ενεργειακά επίπεδα. Μεταβάσεις και κανόνες επιλογής. Μελέτη, κατανόηση, και πρόβλεψη περιστροφικών φασμάτων	**AtΦX** Κεφ. 7ΣΤ **AtΦX** Κεφ. 11Β (εκτός 11Β.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.	**AtΦX** Κεφ. 7Ε **AtΦX** Κεφ. 11Γ **TR** Κεφ. 7 **AtΦX** Κεφ. 11Β.3 **AtΦX** 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.	**AtΦX** Κεφ. 10 **SI** **AtΦX** Κεφ. 11^{E} **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_2CO, H_2O, C_2H_4, C_6H_6)	**AtΦX** Κεφ. 9Α, 9Β **AtΦX** Κεφ. 9Γ, 9Δ **AtΦX** Κεφ. 10Β, 10Γ **AtΦX** Κεφ. 11ΣΤ
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.	**AtΦX** Κεφ. 11ΣΤ, 11Ζ

10.10.2025

Αντιστοίχηση θεμάτων ύλης Φυσικοχημείας στα συγγράμματα AtΦX, AtΦX-2020, AtΦX-2014

	‘*Φυσικοχημεία*’ (AtΦX)	‘*Φυσικοχημεία*’ (AtΦX-2020)	‘*Φυσικοχημεία*’ (AtΦX-2014)
Γενικά περί μοριακής φασματοσκοπίας Εξαναγκασμένες και αυθόρμητες διεργασίες Διαπλάτυνση	Κεφ. 11Α	Κεφ. 11Α	Κεφ. 12.1, 12.2, Ε12.1, Κεφ. 13.1 Περαιτέρω πληροφ. 12.1 (εκτός 12.1γ), 12.2 Κεφ. 13.4(α) Κεφ. 9.6
Ανασκόπηση Κβαντικής Μηχανικής Λύσεις, εφαρμογές της εξίσωσης Schrödinger	Κεφ.7	Κεφ.7	Κεφ.7, Κεφ. 8
Ηλεκτρονική Δομή Ατόμων Ατομική φασματοσκοπία	Κεφ. 8	Κεφ. 8	Κεφ. 9
Μοριακή Δομή, Μοριακά Τροχιακά	Κεφ. 9 (εκτός 9^{E}, 9ΣΤ)	Κεφ. 9 (εκτός 9Ε)	Born-Oppenheimer, Κεφ. 10.1 Θεωρία ΜΤ, Κεφ. 10.3, 10.4, 10.5(α)
Μοριακή συμμετρία - Θεωρία ομάδων	Κεφ. 10	Κεφ. 10	Κεφ. 11
Περιστροφική φασματοσκοπία διατομικών Δονητική (-περιστροφική) φασματοσκοπία (IR, Raman)	Κεφ. 11Β (εκτός 11Β.4) Κεφ. 11Γ, 11Δ, 11Ε	Κεφ. 11Β (εκτός 11Β.4) Κεφ. 11Γ, 11Δ, 11Ε	Κεφ. 12.3 - 12.6, εκτός 12.4(δ) Κεφ. 12.8 - 12.15, μέχρι πριν το 12.15(α), 12.16
Ηλεκτρονική φασματοσκοπία	Κεφ. 11ΣΤ, 11Ζ.1	Κεφ. 11ΣΤ, 11Ζ.1	Κεφ. 13.2-13.6(α)