

# ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ Ι (XHM-048)

## ΜΟΡΙΑΚΗ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ

**Διδάσκων:** Δημήτριος Άγγλος

τηλ. +30-2810-545072

E-MAIL: anglos@uoc.gr

1<sup>η</sup> Εισαγωγική Διάλεξη

Τρίτη 03/10/2023

09:00 – 11:00

Αμφιθέατρο Α1

**Διαλέξεις :** Τρίτη 09:00 – 11:00, Πέμπτη 14:00 – 16:00

**Φροντιστήρια :** Πέμπτη 17:00 – 19:00 (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/>

**Microsoft Teams :** XHM-048 ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ-I (2023-24)

### Προτεινόμενη Βιβλιογραφία (Κλειστή Βιβλιοθήκη)

- [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)
- [CT] R. Chang, J.W. Thoman Jr, 'Φυσικοχημεία' (Εκδόσεις Π. Χ. Πασχαλίδης, Λευκωσία, 2021)
- [TR] Σ. Τραχανάς, 'Κβαντομηχανική Γ' (Πανεπ. Εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο 2021)
- [ER] T. Engel, P. Reid, 'Physical Chemistry' (Pearson Education Inc. San Francisco 2010)
- [HB] D.C. Harris, M.D. Bertolucci, 'Symmetry and Spectroscopy' (Dover, NY 1978)
- [HO] J.M. Hollas, 'Modern Spectroscopy' (John-Wiley & Sons, NY 1996)
- [AdP] P.W. Atkins, J. de Paula, J. Keeler 'Physical Chemistry' (Oxford Univ. Press, Oxford 2018)
- [BMC] C. N. Banwell, E.M. McCash, 'Fundamentals of Molecular Spectroscopy' (McGraw Hill, 1999)
- [NT] Φ. Νταής, 'Φασματοσκοπία' (Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο, Πάτρα 2001)
- [SI] Μ. Π. Σιγάλας, Ν. Δ. Χαριστός, Λ. Δ. Αντώνη, '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

- Εισαγωγικά περί φασματοσκοπίας
- Αξιώματα Κβαντικής Μηχανικής
- Λύσεις και εφαρμογές της εξίσωσης Schrödinger
- Πολυ-ηλεκτρονιακά άτομα. Δομή και φασματοσκοπία (σε συνδυασμό με το εργαστήριο)
- Περιστροφική φασματοσκοπία
- Δονητική φασματοσκοπία
- Μοριακή συμμετρία, Θεωρία ομάδων
- Μοριακά τροχιακά και Ηλεκτρονιακή δομή μορίων
- [Προσεγγιστικές / Υπολογιστικές Μέθοδοι]
- Ηλεκτρονιακή φασματοσκοπία μορίων (διατομικά)
- Ηλεκτρονιακή φασματοσκοπία μορίων (πολυ-ατομικά)
- Φασματοσκοπία φωτοηλεκτρονίων. Τεχνικές Λέιζερ

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

### Εξέταση - Βαθμολόγηση

Ένα (1) Διαγώνισμα Προόδου (ερωτήσεων πολλαπλής επιλογής)

30 %

Τελική γραπτή εξέταση (≥5)

70 %

**Περιεχόμενο Διαλέξεων - Ενότητες στα συγγράμματα**

Ενότητα	Κεφάλαια στα συγγράμματα
Εισαγωγή στο μάθημα. Περιγραφή, στόχοι, συγγράμματα, αξιολόγηση	
<b>Ανασκόπηση βασικών εννοιών Κβαντικής Μηχανικής</b> Τελεστές. Αξιώματα Κβαντικής Μηχανικής. Εξίσωση Schrödinger. Λύσεις και εφαρμογές της εξίσωσης Schrödinger. Σύντομη επανάληψη στα βασικά προβλήματα (φρέαρ δυναμικού, σωματίο σε περιφέρεια κύκλου, επιφάνεια σφαιράς). Κβάντωση ενέργειας, κβάντωση στροφορμής. Επανάληψη στο άτομο του H. Ενεργειακά επίπεδα. Ατομικά τροχιακά.	<b>AtΦΧ</b> Κεφ. 7, 8 <b>TR</b> Κεφ. 5, 9
<b>Εισαγωγικά περί φασματοσκοπίας</b> Τι είναι φάσμα – Γενικά. Μορφή (άξονες, μονάδες κλπ). Παραδείγματα. Νόμος Beer-Lambert, Σημασία ε, κβαντομηχανική ερμηνεία. Συντελεστές Einstein. Φασματικές γραμμές. Διαπλάτνωση (φυσική, Doppler).	<b>AtΦΧ</b> - Κεφ. 11Α <b>TR</b> Κεφ. 15
<b>Πολυ-ηλεκτρονιακά άτομα. Ατομική δομή. Ατομική φασματοσκοπία</b> 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).	<b>AtΦΧ</b> Κεφ. 8 <b>TR</b> Κεφ. 8, 9, 10, 11 <b>EG</b> Κεφ. 8
<b>Εισαγωγή στη Μοριακή Δομή</b> Διατομικά μόρια. Προσέγγιση Born-Oppenheimer	<b>AtΦΧ</b> Κεφ. 9 σελ. 345
<b>Περιστροφική φασματοσκοπία</b> Πρότυπο στροφέα. Ενεργειακά επίπεδα. Μεταβάσεις και κανόνες επιλογής. Μελέτη, κατανόηση, και πρόβλεψη περιστροφικών φασμάτων	<b>AtΦΧ</b> Κεφ. 11B (εκτός 11B.4)
<b>Δονητική φασματοσκοπία</b> 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.	<b>AtΦΧ</b> Κεφ. 7E <b>AtΦΧ</b> Κεφ. 11Γ <b>TR</b> Κεφ. 7  <b>AtΦΧ</b> Κεφ. 11B.3 <b>AtΦΧ</b> Κεφ. 11Δ <b>TR</b> - Κεφ. 7
<b>Μοριακή συμμετρία. Θεωρία Ομάδων</b> 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.	<b>AtΦΧ</b> Κεφ. 10 <b>SI</b> <b>AtΦΧ</b> Κεφ. 11E <b>SI</b>
<b>Χημικός δεσμός. Μοριακά τροχιακά. Ηλεκτρονιακή δομή μορίων</b> Μοριακά τροχιακά σ, π. Βασική ιδέα LCAO. Ηλεκτρονιακή δομή ομο-(ετερο-)πυρηνικών διατομικών Φασματοσκοπικοί όροι διατομικών. Ενεργειακές καταστάσεις. Η περίπτωση του O <sub>2</sub> . Θεμελιώδης triplet. Ηλεκτρονιακή δομή πολυατομικών. Ενέργεια μοριακών τροχιακών. Συμμετρία μοριακών τροχιακών. SALC's. Παραδείγματα (H <sub>2</sub> , O <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> CO, H <sub>2</sub> O, C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> , C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> )	<b>AtΦΧ</b> Κεφ. 9
<b>Ηλεκτρονιακή φασματοσκοπία μορίων</b> 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.	<b>AtΦΧ</b> Κεφ. 11ΣΤ, 11Ζ

**Αντιστοίχιση θεμάτων ύλης Φυσικοχημείας στα συγγράμματα ΑτΦΧ, ΑτΦΧ-2014 και ΑτΦΧ-Π**

	‘Φυσικοχημεία’ (ΑτΦΧ)	‘Φυσικοχημεία’ (ΑτΦΧ-2014)	‘Φυσικοχημεία ΙΙ’ (ΑτΦΧ-Π)
Γενικά περί μοριακής φασματοσκοπίας Εξαναγκασμένες και αυθόρμητες διεργασίες Διαπλάτυνση	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	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 Δονητική (-περιστροφική) φασματοσκοπία (IR, Raman)	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	Αμιγώς περιστροφικά φάσματα Κεφ. 18.4 - 18.6, εκτός 18.4(δ) 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)