

Γενικές Πληροφορίες Μαθήματος	
Τίτλος μαθήματος	Φασματοσκοπία Υπερύθρου και RAMAN
Κωδικός Μαθήματος	[EMΦ06]
Εξάμηνο διδασκαλίας σύμφωνα με τον οδηγό Σπουδών	1 ^ο ή 3 ^ο
Ώρες διδασκαλίας ανά εβδομάδα	2 (Διαλέξεις) και 4 (Εργαστήριο)
Μονάδες ECTS	10
<p>Περιγραφή Διδακτέας Ύλης</p> <p><i>A' Μέρος – Θεωρία</i></p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Βασικές αρχές μοριακής φασματοσκοπίας 2. Αρχές Λειτουργίας Laser 3. Αλληλεπίδραση ακτινοβολίας και ύλης 4. Υπέρυθρη φασματοσκοπία μορίων 5. Φασματοσκοπία Raman <p><i>B' Μέρος – Εργαστηριακές Ασκήσεις</i></p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Αρχές λειτουργίας, χρήση και εφαρμογές ενός παλμικού CO₂ Laser υπερύθρου και επίδειξη λειτουργίας Laser στερεάς (Nd:YAG) και υγρής κατάστασης (Dye). 2. Ποιοτικός χαρακτηρισμός και ανάλυση φασματικών απορροφήσεων απλών μορίων, στην αέρια φάση – Μετασχηματιζόμενη κατά Fourier Δονητικο-περιστροφική Φασματοσκοπία Υπερύθρου (FT-IR). 3. Ποσοτικός προσδιορισμός Ενεργού Διατομής Απορρόφησης Υπερύθρου, σ, σειράς θερμοκηπιακών αερίων – Παρασκευή αερίων μιγμάτων και χειρισμός τους, εφαρμογή του νόμου των Beer-Lambert ($A = \sigma \times l \times [M]$) και προσδιορισμός συγκεντρώσεων και δυναμικού ακτινοβόλησης (Radiative Efficiency, RE). 	
<p>Σκοπός του Μαθήματος</p> <p>Το εν λόγω μάθημα αφορά σε μεταπτυχιακούς φοιτητές των τμημάτων Χημείας και Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών. Σκοπό του μαθήματος αποτελεί η εξοικείωση των φοιτητών με τη δυναμική και το εύρος των σύγχρονων εφαρμογών της αλληλεπίδρασης φωτός και ύλης, τις πληροφορίες που δύνανται να αντληθούν, σε μοριακό επίπεδο και την χρησιμότητά της σε σύγχρονους τομείς έρευνας και επιστήμης, όπως Ατμοσφαιρική Χημεία, Βιο-ιατρική, Τηλεπικοινωνίες, Σύνθεση Νέων Τεχνολογικών Υλικών και την Τέχνη και τις Πολιτισμικές Επιστήμες. Στα συγκεκριμένα πλαίσια, διδάσκονται οι βασικές αρχές που διέπουν όλα τα είδη Laser (αέρια, υγρά, στερεά), που καλύπτουν όλο το φάσμα της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας, και μέσω των εργαστηριακών ασκήσεων αποκτούν εμπειρία από χρήση διαφόρων ειδών laser. Επίσης, αναλύονται, διεξοδικά, οι πληροφορίες που μπορούν να αντληθούν για τον υλικό κόσμο μέσω υπερύθρης φασματοσκοπίας απορρόφησης</p>	

(FT-IR) και σκέδασης (Raman), οι θεμελιώδεις έννοιες που τις διέπουν, κατά τη χρήση τους για τον ποιοτικό και ποσοτικό χαρακτηρισμό του υλικού κόσμου και η κρισιμότητα των διαφόρων τεχνικών παραμέτρων, όπως διακριτική ικανότητα, ευαισθησία, ακρίβεια και συστηματικά σφάλματα, κατά τη λήψη φασμάτων.

Μέθοδος Αξιολόγησης Φοιτητών

Εργαστηριακές Ασκήσεις: 30 %

Συνολική αναφορά: 30 %

Παρουσίαση Συνδυασμένων Εργασιών και Προφορική Εξέταση: 40%

Προαπαιτούμενες γνώσεις για την ομαλή παρακολούθηση

Βάσει Οδηγού Σπουδών Τμήματος Χημείας: Φυσικοχημεία I & II (Κβαντική μηχανική, Θεωρία Ομάδων, Μοριακή Φασματοσκοπία, Θερμοδυναμική, Χημική Κινητική), Εργαστήρια Φυσικοχημείας I & II (ή ισοδύναμα), Θεμελιώδεις έννοιες αρχών Laser και Φασματοσκοπίας, Κανόνες Ασφάλειας Χρήσης Φιαλών Υπερπίεσης και Τεχνολογία κενού.

Προτεινόμενα συγγράμματα

1. Modern Spectroscopy, J.M. Hollas, Wiley & Sons
2. Spectroscopy, B.P. Straughan and S. Walker, Chapman and Hall.
3. Spectroscopy and structure, R.N. Dixon, Methuen & Co.
4. Molecular reaction dynamics and chemical reactivity, R. D. Levine and R. B. Bernstein, Oxford University press.
5. Φυσικοχημεία, P. W. Atkins & Julio De Paula, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης.
6. Symmetry and Spectroscopy, An introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy, D. C. Harris and M. D. Bertolucci.
7. J. Coates, "Interpretation of Infrared Spectra, A Practical Approach", Encyclopedia of Analytical Chemistry (Ed. R. A. Meyers), 2000, 10815 - 10837
8. W. Demtröder, 'Laser Spectroscopy : Basic concepts and instrumentation' (Springer, Berlin 2003)

General Course Information	
Course title	Infrared and Raman Spectroscopy
Course Number	[EMΦ06]
Teaching semester (according to the Study Guide)	1 st and 3 rd
Teaching hours per week	2 (Courses) 4 (Lab)
ECTS credits	10
Curriculum	
<i>Part A – Theory</i>	
<ol style="list-style-type: none"> 1. Fundamental Principles of Molecular Spectroscopy 2. Basic Concepts of Laser 3. Interaction of Radiation and Matter 4. Infrared Molecular Spectroscopy 5. Raman Spectroscopy 	
<i>Part B – Laboratory Exercises</i>	
<ol style="list-style-type: none"> 4. Basic concepts, operation and applications of an infrared pulsed CO₂ Laser and operational demonstration of solid state (Nd:YAG) and Liquid state Laser (Dye). 5. Qualitative characterization and spectra analysis for simple molecules absorption in the gas phase – Fourier Transformed vibrational and rotational spectroscopy (FT-IR). 6. Infrared absorption cross-section quantitative determination, σ, for a series of greenhouse gases – Gas mixtures preparation and operation, Beer-Lambert law application ($A = \sigma \times l \times [M]$) for concentration determination and radiative efficiency (RE). 	
Purpose of the Course	
<p>The course is given to graduate students of Chemistry and Materials Science and Technology departments. The aim of the course is to make students familiar with the potent and the range that the interaction of light and matter is involved in modern applications, as well as, the information may be learned, at the molecular level, and the usability in contemporary areas of research and science, including atmospheric chemistry, bio-medical, Telecommunications, New Materials Synthesis Technology and Art and Cultural Sciences. In specific contexts, they are taught the basic principles governing all types Laser (gas, liquid, solid), covering the whole spectrum range of electromagnetic radiation, and through laboratory exercises, to gain experience by using different laser types. Qualitative and quantitative information about molecules and materials that can be learned by using infrared absorption spectroscopy (FT-IR) and scattering (Raman) are thoroughly analyzed, as well as the</p>	

basic concepts of their operation. The significance of the different technical parameters such as resolution, sensitivity, precision and systematic uncertainties, are also taught during spectra recording.

Student Assessment Method(s)

Laboratory Exercises: 30 %

Total Report: 30 %

Presentation and Oral Exams: 40%

Background knowledge Prerequisites

Based on Chemistry Department Education Guide: Physical Chemistry I & II (Quantum Mechanics, Group Theory, Molecular Spectroscopy, Thermodynamics, Chemical Kinetics), Physical Chemistry Labs I &II (or equivalent), Fundamental Concepts of Lasers και Spectroscopy, Safety guides for High pressure gas-cylinders usage and Vacuum Technology.

Suggested literature

1. Modern Spectroscopy, J.M. Hollas, Wiley & Sons
2. Spectroscopy, B.P. Straughan and S. Walker, Chapman and Hall.
3. Spectroscopy and structure, R.N. Dixon, Methuen & Co.
4. Molecular reaction dynamics and chemical reactivity, R. D. Levine and R. B. Bernstein, Oxford University press.
5. Physical Chemistry P. W. Atkins & Julio De Paula, University of Crete.
6. Symmetry and Spectroscopy, An introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy, D. C. Harris and M. D. Bertolucci.
7. J. Coates, "Interpretation of Infrared Spectra, A Practical Approach", Encyclopedia of Analytical Chemistry (Ed. R. A. Meyers), 2000, 10815 - 10837
8. W. Demtröder, 'Laser Spectroscopy : Basic concepts and instrumentation' (Springer, Berlin 2003)