

ΜΑΘΗΜΑ	:	ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ II
ΚΩΔΙΚΟΣ	:	Υ401
ΤΥΠΟΣ	:	Υποχρεωτικό
ΔΙΔΑΣΚΩΝ	:	ΑΘΑΝΑΣΙΟΣ ΜΗΤΡΟΠΟΥΛΟΣ
ΕΞΑΜΗΝΟ	:	4ο
ΩΡΕΣ	:	4 ω/ε (θεωρία)
ECTS	:	6
ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ	:	<ol style="list-style-type: none"> 1. Αρχές Κβαντικής Μηχανικής. ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία, ακτινοβολία μέλανος σώματος, φωτοηλεκτρικό φαινόμενο, φαινόμενο Compton, θεωρία του Bohr, κυματοσωματιδιακός δυϊσμός της ύλης. Εξίσωση Schrödinger. Η ερμηνεία της κυματοσυνάρτησης από τον Born. 2. Τεχνικές και εφαρμογές Κβαντικής θεωρίας. Μεταφορική κίνηση. Ταλαντωτική κίνηση. Περιστροφική κίνηση. 3. Ατομική δομή και ατομικά φάσματα. Η δομή και τα φάσματα υδρογονοειδών ατόμων. Δομή πολυηλεκτρονιακών ατόμων. Ορίζουσα Slater. Αρχή του Pauli. Τα φάσματα πολύπλοκων ατόμων. 4. Εισαγωγή στη μοριακή κβαντική χημεία. Η προσέγγιση Born-Oppenheimer. Θεωρία δεσμού-σθένους. Θεωρία μοριακών τροχιακών. Μοριακά τροχιακά για πολυατομικά συστήματα. 5. Μοριακή συμμετρία. Στοιχεία θεωρίας ομάδων. Εφαρμογές της συμμετρίας στη θεωρία των μοριακών τροχιακών-Πολυατομικά μόρια. Θεωρία εντοπισμένων μοριακών τροχιακών. Υβριδισμός. Υπολογιστικές τεχνικές στην Κβαντική Χημεία. Η προσέγγιση Hückel και πρόβλεψη μοριακών ιδιοτήτων. 6. Στατιστική θερμοδυναμική. Η κατανομή των μοριακών καταστάσεων. Εσωτερική ενέργεια και εντροπία. Η κανονική συνάρτηση επιμερισμού. Ανεξάρτητα μόρια. 7. Εφαρμογές Στατιστικής Θερμοδυναμικής. Μέσες ενέργειες, θερμοχωρητικότητες, σταθερές ισορροπίας. Στατιστικές ιδιότητες Μακρομορίων – Κολλοειδή. 8. Μοριακές αλληλεπιδράσεις. Ηλεκτρικές ιδιότητες των μορίων. Πολωσιμότητα. Πόλωση. Αλληλεπιδράσεις μεταξύ μορίων. Μοριακές αλληλεπιδράσεις σε αέρια. Διεπιφάνεια υγρού-ατμού. Επιφανειακές μεμβράνες. Συμπύκνωση. 9. Μοριακή κίνηση στα αέρια. Μοριακή κίνηση στα υγρά. Διάχυση. 10. Ταχύτητα χημικών αντιδράσεων. Πειραματικός νόμος ταχύτητας. Τάξη αντίδρασης και ολοκληρωμένοι νόμοι ταχύτητας. Εξάρτηση από τη θερμοκρασία και εξίσωση Arrhenius. Προσδιορισμός του μηχανισμού της αντίδρασης από το νόμο ταχύτητας. Στοιχειώδεις αντιδράσεις. Διαδοχικές αντιδράσεις. Παραδείγματα μηχανισμών αντίδρασης. Φωτοχημεία. 11. Η δυναμική των αντιδράσεων. Δραστικές συναντήσεις. Θεωρία κρούσεων. Θεωρία μεταβατικής κατάστασης.
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	:	ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑ, , ATKINS PETER - DE PAULA JULIO, ISBN: 978-960-524-431-6, ΙΔΡΥΜΑΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ&ΕΡΕΥΝΑΣ-ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑΚΕΣΕΚΔΟΣΕΙΣΚΡΗΤΗΣ