

SCUOLA	Scienze di Base e Applicate
ANNO ACCADEMICO	2016-2017
CORSO DI LAUREA	Chimica
INSEGNAMENTO	Chimica Fisica III con laboratorio
TIPO DI ATTIVITÀ	Caratterizzanti (mod 1)/Affini e Integrative (mod 2)
AMBITO DISCIPLINARE	Discipline Inorganiche Chimico Fisiche (mod 1) Attività formative affini o integrative (mod 2)
CODICE INSEGNAMENTO	13737
ARTICOLAZIONE IN MODULI	Modulo 1: Chimica Fisica III Modulo 2: Laboratorio di Chimica Fisica III
SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI	CHIM/02
DOCENTE RESPONSABILE (MODULO 1)	Prof. Michele Floriano PO Dipartimento STEBICEF – Università degli Studi di Palermo
DOCENTE RESPONSABILE (MODULO 2)	Prof.ssa Delia Francesca Chillura Martino PA Dipartimento STEBICEF – Università degli Studi di Palermo
CFU (Modulo 1)	8
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE (Modulo 1)	136
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE (Modulo 1)	64
CFU (Modulo 2)	6 (2+4)
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE (Modulo 2)	74
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE (Modulo 2)	76
PROPEDEUTICITÀ	Nessuna
ANNO DI CORSO	Terzo
SEDE DI SVOLGIMENTO DELLE LEZIONI	- Aula D per le lezioni frontali - Laboratori didattici per le esperienze di laboratorio
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali (modulo 1), Lezioni frontali e Esperienze di Laboratorio (modulo 2)
MODALITÀ DI FREQUENZA	Obbligatoria
METODI DI VALUTAZIONE	Esame orale con discussione delle relazioni di laboratorio
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
PERIODO DELLE LEZIONI	II Semestre
CALENDARIO DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE	Modulo 1: Mart.- Merc.- Giov. ore 11-13 Modulo 2: Mart.- Merc.- Giov. ore 14-18 come da definire secondo calendario
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	Modulo 1: Lunedì ore 11-13 oppure su appuntamento Modulo 2: Martedì ore 11-13 oppure su

RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI**Conoscenza e capacità di comprensione**

Acquisizione dei concetti fondamentali di meccanica quantistica e statistica per la comprensione del legame esistente fra proprietà microscopiche e macroscopiche della materia. Capacità di utilizzare il linguaggio specifico proprio della disciplina.

Capacità di costruzione di opportuni modelli teorici per lo studio di proprietà termodinamiche e strutturali anche in relazione a limitazioni di tipo computazionale.

Conoscenza delle leggi che governano le interazioni intermolecolari, delle leggi fondamentali della Termodinamica, della Meccanica Quantistica (MQ) e della Spettroscopia

Capacità di applicare conoscenza e comprensione

Capacità di riconoscere le caratteristiche essenziali e le specifiche interazioni microscopiche che consentono di interpretare e prevedere il comportamento macroscopico.

Autonomia di giudizio

Essere in grado di valutare le implicazioni legate ad un approccio modellistico.

Capacità di applicare a problemi specifici le conoscenze delle leggi e dei principi della meccanica quantistica, della termodinamica e della spettroscopia.

Capacità di realizzare esperimenti di termodinamica, cinetica, meccanica quantistica e spettroscopia.

Autonomia di giudizio

Dimostrare di avere la capacità di formulare giudizi autonomi sui problemi scientifici, di avere la capacità di effettuare esperimenti e interpretare i dati.

Abilità comunicative

Capacità di esporre, anche ad un pubblico non esperto i limiti e vantaggi di modelli interpretativi alternativi. Essere in grado di sostenere l'importanza dell'uso di modelli microscopici e di specifiche applicazioni.

Capacità d'apprendimento

Capacità di sintesi ed elaborazione chiara e personale dei concetti esaminati

Capacità d'apprendimento

Ci si aspetta lo sviluppo calibrato delle capacità di apprendimento che consentano di affrontare, con un alto grado di autonomia, studi specialistici.

OBIETTIVI FORMATIVI DEL CORSO

Il modulo 1 del corso si propone di creare una base di MQ, spettroscopia, interazioni intermolecolari e metodi computazionali

MODULO	DENOMINAZIONE DEL MODULO
	Chimica Fisica III
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
2	Introduzione al corso. Discussione di programma e contenuti. Libri di testo. Connessione fra proprietà macroscopiche e caratteristiche microscopiche della materia.
4	Inadeguatezze delle leggi della Fisica classica. Radiazione da corpo nero. Effetto fotoelettrico. Spettri atomici. Capacità termiche a basse temperature. Diffrazione di elettroni.
6	I postulati della Meccanica Quantistica. La funzione d'onda; gli operatori quantomeccanici; il valore d'attesa di un osservabile fisico; l'equazione di Schrödinger.
6	Risoluzione dell'equazione di Schrödinger. La particella libera; il principio di indeterminazione di Heisenberg e il dualismo ondacorpusco; le fughe quantistiche.
8	La particella confinata; la quantizzazione dell'energia. Il rotore rigido; quantizzazione del momento angolare. L'oscillatore armonico. Gli atomi idrogenoidi; gli orbitali atomici. Gli insuccessi della Fisica Classica spiegati dalla Teoria Quantistica. Cenni sul problema polielettronico. L'Hamiltoniano di un atomo polielettronico e di un sistema molecolare. L'approssimazione di Born-Oppenheimer. Lo spin elettronico. La funzione d'onda come determinante di Slater e gli orbitali molecolari. Il metodo variazionale. Applicazione alla molecola d'idrogeno.
6	Lo spettro elettromagnetico. Interazione radiazione - materia. Aspetti generali della spettroscopia molecolare. Regole di selezione. Assorbimento ed emissione. Forma delle righe spettrali.
4	Assorbimento di microonde. Spettroscopia rotazionale in fase gassosa.
4	Assorbimento nell'infrarosso. Spettroscopia vibrazionale in fase gassosa e in soluzione. Modi normali di vibrazione. Uso di spettri vibrazionali per il riconoscimento di sostanze.
4	Assorbimento nel visibile e UV. Spettroscopia elettronica. Decadimento dello stato eccitato. Fluorescenza e fosforescenza.
4	Stato gassoso. Il gas ideale. Deviazioni dal comportamento ideale. Fattore di compressibilità. Equazione di van der Waals. Interazioni intermolecolari e forze di dispersione. Transizioni di fase. La regione critica e caratteristiche di universalità. Legge degli stati corrispondenti.

6	Sistemi di particelle interagenti. Potenziali di interazione empirici. Potenziali ab initio. Energia potenziale configurazionale. Lo stato liquido. Aspetti strutturali e dinamici. Concetto di struttura anche in relazione alle proprietà molecolari. Ordine e disordine. La funzione di correlazione di coppia.
6	Metodi computazionali. Tecniche di simulazione: principi fondamentali. Metodi deterministici (dinamica molecolare e metodi stocastici (Monte Carlo). Confronto fra i due metodi.
4	Concetti fondamentali riguardanti fenomeni lontani dall'equilibrio. Fenomeni caotici e dipendenza dalle condizioni iniziali. Mappa logistica
TESTI CONSIGLIATI	<p>Testi di riferimento:</p> <p>Peter W. Atkins and Julio De Paula, Atkins' Physical Chemistry, Ed. IX 2009 Oxford University Press, ISBN 978-0-19-954337-3</p> <p>Peter W. Atkins, Julio De Paula, Chimica Fisica, V edizione (realizzata sulla IX edizione originale), Zanichelli, 2012. ISBN 9788808261380</p> <p>R.L. Rowley, Statistical Mechanics for Thermophysical Property Calculations, PTR Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, USA, 1994</p> <p>Testi di consultazione:</p> <p>D.A. McQuarrie, Statistical Mechanics, Harper & Row, 1976</p> <p>T.L. Hill, An Introduction to Statistical Thermodynamics, Dover Publ., NY, 1986</p> <p>D. Frenkel and B. Smit, Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications, Academic Press, 1996</p> <p>M.P. Allen and D.J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Clarendon Press, Oxford, 1987</p>

MODULO	DENOMINAZIONE DEL MODULO
	Laboratorio di Chimica Fisica III
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
2	Introduzione al modulo. Illustrazione alle basilari nozioni di sicurezza in laboratorio. Descrizione della modalità di stesura delle relazioni di laboratorio.
4	Descrizione della strumentazione in uso nel laboratorio. Richiami su limiti di sensibilità, riproducibilità e affidabilità di una misura.
8	Presentazione delle esperienze da svolgere.
2	Richiami sui metodi analitici di elaborazione dei dati.
N. ESPERIENZA	ESPERIENZE DI LABORATORIO
1	Termodinamica classica: determinazione dell'entalpia di evaporazione mediante l'equazione di Clausius-Clapeyron

2	Cinetica chimica: cinetiche di reazioni chimiche mediante spettroscopia di assorbimento
3	Proprietà macroscopiche di sistemi non ideali: determinazione della cmc di un tensioattivo
4	Termodinamica classica: studio di grandezze termodinamiche di sistemi non ideali
5	Spettroscopia di base: bande vibroniche attraverso spettroscopia di emissione e di assorbimento e determinazione di proprietà molecolari
6	Meccanica Quantistica: Calcolo della struttura vibrazionale della prima banda dello spettro elettronico, in assorbimento e in fluorescenza, di una molecola biatomica
7	Proprietà microscopiche di sistemi non ideali: calcolo delle funzioni di correlazione di coppia
TESTI CONSIGLIATI	<p>Testi di riferimento:</p> <p>Peter W. Atkins and Julio De Paula, Atkins' Physical Chemistry, Ed. IX 2009 Oxford University Press, ISBN 978-0-19-954337-3</p> <p>Peter W. Atkins, Julio De Paula, Chimica Fisica, V edizione (realizzata sulla IX edizione originale), Zanichelli, 2012. ISBN 9788808261380</p> <p>D.A. McQuarrie, J. D. Simon – “Chimica Fisica, un approccio molecolare”</p> <p>Appunti e materiale fornito dal docente</p>