UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PALERMO

DIPARTIMENTO	Scienze e Tecnologie Biologiche, Chimiche e Farmaceutiche
ANNO ACCADEMICO OFFERTA	2015/2016
ANNO ACCADEMICO EROGAZIONE	2017/2018
CORSO DILAUREA	CHIMICA
INSEGNAMENTO	CHIMICA FISICA III CON LABORATORIO
CODICE INSEGNAMENTO	13737
MODULI	Si
NUMERO DI MODULI	2
SETTORI SCIENTIFICO-DISCIPLINARI	CHIM/02
DOCENTE RESPONSABILE	FLORIANO MICHELE Professore Ordinario Univ. di PALERMO
ALTRI DOCENTI	FLORIANO MICHELE Professore Ordinario Univ. di PALERMO CHILLURA MARTINO DELIA FRANCESCA Professore Ordinario Univ. di PALERMO
CFU	14
PROPEDEUTICITA'	15563 - CHIMICA FISICA II 00133 - CHIMICA GENERALE ED INORGANICA 15248 - ESERCITAZIONI DI PREPARAZIONI CHIMICHE CON LABORATORIO
MUTUAZIONI	
ANNO DI CORSO	3
PERIODO DELLE LEZIONI	2° semestre
MODALITA' DI FREQUENZA	Obbligatoria
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	**CHILLURA MARTINO DELIA FRANCESCA** Lunedì 15:00 16:00 Studio Prof. Chillura. Ed. 17 - Viale delle Scienze **FLORIANO MICHELE** Martedì 15:00 18:00 Via skype Per appuntamento e-mail Mercoledì 15:00 18:00 Via skype Per appuntamento e-mail Giovedì 15:00 18:00 Via skype Per appuntamento e-mail

DOCENTE: Prof. MICHELE FLORIANO

PREREQUISITI	
RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI	1.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 2.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. 3.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. Dimostrare di avere la capacità di formulare giudizi autonomi sui problemi scientifici, di avere la capacità di effettuare esperimenti e interpretare i dati. 4.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 5.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
VALUTAZIONE DELL'APPRENDIMENTO	Esame orale con discussione delle relazioni di laboratorio
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali (modulo 1), Lezioni frontali e Esperienze di Laboratorio (modulo 2)

MODULO
CHIMICA FISICA III

Prof. MICHELE FLORIANO

TESTI CONSIGLIATI

Testi di riferimento:
Peter W. Atkins and Julio De Paula, Atkins' Physical Chemistry, Ed. IX 2009 Oxford University Press, ISBN 978-0-19-954337-3
Peter W. Atkins, Julio De Paula, Chimica Fisica, V edizione (realizzata sulla IX edizione originale), Zanichelli, 2012. ISBN 9788808261380

Testi di consultazione:
R.L. Rowley, Statistical Mechanics for Thermophysical Property Calculations, PTR Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, USA, 1994
D.A. McQuarrie, Statistical Mechanics, Harper & Row, 1976

TIPO DI ATTIVITA'	B
AMBITO	50135-Discipline chimiche inorganiche e chimico-fisiche
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	136
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITA' DIDATTICHE ASSISTITE	64

OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO

Creare una base di MQ, spettroscopia, interazioni intermolecolari e metodi computazionali

PROGRAMMA

ORE	Lezioni
2	Introduzione al corso. Discussione di programma e contenuti. Libri di testo. Connessione fra proprietà macroscopiche e caratteristiche microscopiche della materia
6	Inadeguatezze delle leggi della Fisica classica. Radiazione da corpo nero. Effetto fotoelettrico. Spettri atomici. Capacità termiche a basse temperature. Diffrazione di elettroni.
8	I postulati della Meccanica Quantistica. La funzione d'onda; gli operatori quantomeccanici; il valore d'attesa di un osservabile fisico; l'equazione di Schrödinger.
8	Risoluzione dell'equazione di Schrödinger. La particella libera; il principio di indeterminazione di Heisenberg e il dualismo ondacorpuscolo; 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.
4	Introduzione alle tecniche di simulazione. Principi fondamentali del metodo della dinamica molecolare.

MODULO
LABORATORIO DI CHIMICA FISICA

Prof.ssa DELIA FRANCESCA CHILLURA MARTINO

TESTI CONSIGLIATI	
Peter William Atkins, Julio de Paula, Chimica fisica, V Ed Italiana Materiale fornito dal docente	
TIPO DI ATTIVITA'	C
AMBITO	10693-Attività formative affini o integrative
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	74
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITA' DIDATTICHE ASSISTITE	76
OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO	
Il modulo di laboratorio del corso si propone di applicare le conoscenze acquisite nei corsi di chimica fisica del triennio di laurea mediante esperienze di termodinamica, meccanica quantistica, spettroscopia e cinetica.	

PROGRAMMA

ORE	Lezioni
16	Introduzione e finalità del corso. Presentazione del calendario. Modalità di stesura delle relazioni di laboratorio. Richiami sulle norme di sicurezza da rispettare in laboratorio. Illustrazione delle esperienze e descrizione delle apparecchiature scientifiche.

ORE	Laboratori
10	Cinetica chimica: determinazione dell'ordine di reazione e della costante cinetica di una reazione chimica. Esecuzione dell'esperienza e stesura della relazione di laboratorio.
10	Termodinamica classica: determinazione dell'isoterma di adsorbimento di un gas sulla superficie di un materiale mesoporoso. Esecuzione dell'esperienza e stesura della relazione di laboratorio.
10	Proprietà macroscopiche di sistemi non ideali: determinazione della cmc di un tensioattivo. Esecuzione dell'esperienza e stesura della relazione di laboratorio.
10	Struttura della materia: determinazione delle dimensioni di particelle disperse in un mezzo solvente mediante scattering dinamico di luce. Esecuzione dell'esperienza e stesura della relazione di laboratorio.
10	Spettroscopia di base: bande vibroniche attraverso spettroscopia di emissione e di assorbimento e determinazione di proprietà molecolari. Esecuzione dell'esperienza e stesura della relazione di laboratorio.
10	Meccanica Quantistica: Calcolo della struttura vibrazionale della prima banda dello spettro elettronico, in assorbimento e in fluorescenza, di una molecola biatomica. Esecuzione dell'esperienza e stesura della relazione di laboratorio.