

| | |
|--|--|
| FACOLTÀ | Scienze MM.FF.NN. |
| ANNO ACCADEMICO | 2015-2016 |
| CORSO DI LAUREA (o LAUREA MAGISTRALE) | 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. Delia F. 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 | Secondo il calendario approvato dal CISC |
| ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI | Modulo 1: Lunedì ore 11-13 Modulo 2: Martedì ore 11-13 |

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

Il modulo 2 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.

| 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 logica |
| 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 2 | DENOMINAZIONE DEL MODULO |
|--------------------------|---|
| | Laboratorio di Chimica Fisica III |
| 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. |
| | ESPERIENZE DI LABORATORIO |
| Numero esperienza | |
| 1 | Termodinamica classica: determinazione dell'entalpia di evaporazione mediante l'equazione di Clausius-Clapeyron. |
| 2 | Cinetica chimica: cinetiche di reazioni chimiche attraverso 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 | Peter W. Atkins, Julio De Paula, Chimica Fisica, V edizione (realizzata sulla IX edizione originale), Zanichelli, 2012. ISBN 9788808261380 |

| | |
|--|--|
| | D.A. McQuarrie, J. D. Simon – “Chimica Fisica, un approccio molecolare” Appunti e materiale fornito dal docente |
|--|--|