



**UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA**  
**DIPARTIMENTO DI SCIENZE**

**Insegnamento Chimica Fisica II**

**Corso di studio:** Chimica

**Anno di Corso:** II

**Periodo** Secondo Semestre  
**didattico:**

**Tipologia:** Base

**Totale Crediti:** 6

**Tipo Esame:** Orale

**Valutazione:** voto

**Lingua di** Italiano  
**insegnamento:**

inizio corso dal 4 al 14 marzo    fine corso dal 19 maggio al 27 giugno

**APPELLI DI ESAME**

Mese	Anno	Appello previsto
Febbraio	2015	
Marzo	2015	
Aprile	2015	
Maggio	2015	
Giugno	2015	X
Luglio	2015	X
Settembre	2015	X
Ottobre	2015	X
Novembre	2015	X
Dicembre	2015	X
Gennaio	2016	X

**COMMISSIONE ESAME:**

Presidente: Camilla Minichino  
Componente: Luciano D'Alessio  
Componente: Angela De Bonis  
Componente: Roberto Teghil

**ORARIO RICEVIMENTO STUDENTI**

	dalle ore	alle ore	presso
LUNEDI'			
MARTEDI'	14	16	Studio 3d103b
MERCOLEDI'	15	16	Studio 3d 103b
GIOVEDI'			
VENERDI'			



# UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA

## DIPARTIMENTO DI SCIENZE

### Eventuali prerequisiti

Corsi Sugeriti: Chimica Generale, Matematica I e II, Fisica I e II.

### Obiettivi Formativi

L'obiettivo del corso è quello di fornire una comprensione dei principi e delle tecniche della meccanica quantistica in modo da affinare le capacità di descrizione teorica della struttura e delle proprietà di atomi e molecole.

Lo studente alla fine del corso deve dimostrare di a) conoscere i fondamenti della meccanica quantistica ed i modelli che sono alla base della teoria del legame chimico e della spettroscopia molecolare, b) comprendere l'importanza dell'uso della simmetria nello studio della struttura elettronica delle molecole, c) essere in grado di risolvere in maniera qualitativa e quantitativa semplici problemi di chimica quantistica.

### Programma del Corso

Origini della teoria quantistica. Principi di meccanica quantistica nella rappresentazione delle coordinate di Schrödinger sistemi monodimensionali in potenziali a segmenti costanti e sue applicazioni in chimica. L'oscillatore armonico e il modello spettroscopico del rotatore rigido. Atomi idrogenoidi. Cenni sulla formulazione di Dirac della meccanica quantistica indipendente dal tempo. Momento angolare generalizzato, spin, composizione di momenti angolari, accoppiamento spin-orbita determinante di Slater come funzione d'onda per elettroni indipendenti e principio di esclusione di Pauli. Atomi p e d: configurazione elettronica, schemi di accoppiamento e stati elettronici. Simmetria molecolare e teoria dei gruppi. Introduzione ai moti elettronici e nucleari, definizione e caratterizzazione della superficie di energia potenziale, la teoria degli orbitali molecolari, metodo di Hückel, configurazioni elettroniche, stati elettronici e simboli di termine, principi base dei metodi *ab initio*, semiempirici e DFT per il calcolo della struttura e delle proprietà molecolari.

### Metodi didattici

lezioni frontali / esercitazioni per la risoluzione di problemi

### Modalità di verifica dell'apprendimento

esame finale e verifiche parziali durante il corso

### Testi di Riferimento

P. W. Atkins, P.W e Friedman, R. (2000), *Meccanica Quantistica Molecolare*. Zanichelli.

Appunti e presentazioni del corso.

*Testi supplementari:*

Cohen-Tannoudji, C.; Diu, B. e Laloe, F. (1977), *Quantum mechanics. Vol. 1 e 2*, Wiley

Demtroder, W. (2010), *Atoms, Molecules and Photons. II Edition*, Springer.

Feynman, R. P.; Leighton, R. B. e Sands, M. (2007), *La fisica di Feynman. Vol 3: Meccanica Quantistica*, Zanichelli.

Holzner, S. (2010), *Quantum Physics Workbook For Dummies*, Wiley.

Larsson, S. (2012), *Chemical Physics. Electrons and Excitations*, CRC Press.

Piela, L. (2007), *Ideas of Quantum Chemistry*, Elsevier.

Rigamonti, A. e Carretta, P. (2009), *Structure of Matter: An Introductory Course with Problems and Solutions: II Edition*, Springer.

Altre informazioni: ricevimento in altri orari/giorni da concordare con il docente via e-mail (camilla.minichino@unibas.it)





**UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA**  
**DIPARTIMENTO DI SCIENZE**

**Course of Chemistry studies:**

**Academic Year:** 2014-2015

**ECTS:** 6

**Teaching** Lectures – problems solving activities

**Methods:**

**Evaluation** final exam and evaluation tests during the course

**Methods:**

**Evaluation:** score on 30 points

**Semester:** II

**Language:** ITALIAN

Course beginning on 4 - 14 march ending on 19 may - 27 june

**Calls for examination**

Month	Year	Expected call
February	2015	
March	2015	
April	2015	
May	2015	
June	2015	x
July	2015	x
September	2015	x
October	2015	x
November	2015	x
December	2015	x
January	2016	x

**Examination Panel:**

President: Camilla Minichino

Member: Luciano D'Alessio

Member: Angela De Bonis

Member: Roberto Teghil

**Previous requirements:**

General Chemistry , Mathematics I and II , Physics I and II. (Recommended courses)

**Learning Outcomes:**

The aim of the course is to provide a basic understanding of the principles and techniques





# UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA

## DIPARTIMENTO DI SCIENZE

of quantum mechanics in order to refine the skills in the theoretical description of the structure and properties of atoms and molecules.

At the end of the course the students must demonstrate to a) know the fundamentals of quantum mechanics and the models that form the basis of the theory of chemical bonding and molecular spectroscopy; b) understand the importance of the use of symmetry in the study of the electronic structure of molecules; c) be able to solve qualitative and simple quantitative problems in quantum chemistry.

### Syllabus:

Origins of the quantum theory. Postulates and some fundamental principles of quantum mechanics in the coordinate representation of Schrödinger. The time-independent Schrödinger equation for one-dimensional systems in piecewise constant potentials and its applications in chemistry. The harmonic oscillator and the molecular vibrations. The orbital angular momentum and the spectroscopic model of the rigid rotor. Hydrogen-like atoms. Overview of Dirac formulation of quantum mechanics. Variational method and time-independent perturbation theory. Generalized angular momentum, spin, the angular momentum in composite systems, spin-orbit coupling. Identical particles and indistinguishability, Slater determinant as wavefunction of independent electrons and the Pauli exclusion principle. Polyelectronic atoms: separability and orbital approximation, electronic configuration, coupling schemes and electronic states. Molecular symmetry and group theory. Introduction to the molecular structure: separation between nuclear and electronic motions, definition and characterization of the potential energy surface, molecular orbital theory, classification and qualitative building of molecular orbitals, the Hückel method, electronic configurations, electronic states and molecular term symbols, basic principles of valence bond theory. Overview of *ab initio*, semiempirical and DFT methods for computing the electronic structure and properties of molecules.

### Suggested textbooks

Atkins, P. & Friedman, R. (2005), *Molecular Quantum Mechanics. IV Ed.*, Oxford University Press.

Lecture Notes and presentations,

#### Additional Readings:

Cohen-Tannoudji, C.; Diu, B. & Laloe, F. (1977), *Quantum mechanics. Vol. 1 and 2*, Wiley

Demtroder, W. (2010), *Atoms, Molecules and Photons. II Edition*, Springer.

Feynman, R. P.; Leighton, R. B. & Sands, M. (1964), *The Feynman lectures on physics. Vol 3: Quantum mechanics*, Addison

Holzner, S. (2010), *Quantum Physics Workbook For Dummies*, Wiley.

Larsson, S. (2012), *Chemical Physics. Electrons and Excitations*, CRC Press.

Piela, L. (2007), *Ideas of Quantum Chemistry*, Elsevier.

Rigamonti, A. & Carretta, P. (2009), *Structure of Matter: An Introductory Course with Problems and Solutions: II Edition*, Springer.

### Further information:

