

ANNO ACCADEMICO: **2016-2017**INSEGNAMENTO/MODULO: **CHIMICA FISICA II**TIPOLOGIA DI ATTIVITÀ FORMATIVA: **Caratterizzante**DOCENTE: **Prof. Camilla Minichino**e-mail: **camilla.minichino@unibas.it**

sito web:

telefono: **0971206158**cell. di servizio: **3204371123**Lingua di insegnamento: **ITALIANO**n. CFU: **6**
(6 di lezione)n. ore: **48**
(48 di lezione)Sede: **Potenza**
Dipartimento/Scuola:
Dipartimento di Scienze
CdS: **CHIMICA(L27)**Semestre: **II**
(date previste di
inizio e fine
corso:
06/03/2017,
15/06/2017)**OBIETTIVI FORMATIVI E RISULTATI DI APPRENDIMENTO**

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 il nesso tra simmetria e meccanica quantistica e saper far uso della teoria dei gruppi nello studio della struttura elettronica delle molecole, c) essere in grado di risolvere in maniera qualitativa e quantitativa semplici problemi di meccanica quantistica applicata alla chimica.

PREREQUISITI

Chimica generale, calcolo differenziale ed integrale, algebra lineare, meccanica classica, elettromagnetismo e onde.

CONTENUTI DEL CORSO**Principi ed applicazioni di meccanica quantistica (24 ore)**

Origini della teoria quantistica. Principi di meccanica quantistica nella rappresentazione delle coordinate di Schrödinger. L'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo per sistemi monodimensionali in potenziali a segmenti costanti e sue applicazioni in chimica. L'oscillatore armonico e le vibrazioni molecolari. Il momento angolare orbitale ed il modello spettroscopico del rotatore rigido. Atomi idrogenoidi. Cenni sulla formulazione di Dirac della meccanica quantistica. Metodo variazionale e teoria perturbativa indipendente dal tempo. Momento angolare generalizzato, spin, composizione di momenti angolari, momenti magnetici ed accoppiamento spin-orbita. Struttura fine ed iperfine degli atomi idrogenoidi. Sistemi con più particelle identiche e postulato di simmetrizzazione/antisimmetrizzazione.

Struttura Atomica (6 ore)

Atomi polielettronici: separabilità e approssimazione orbitalica, determinante di Slater come funzione d'onda per elettroni indipendenti, costruzione autoconsistente del potenziale efficace, configurazione elettronica, schemi di accoppiamento e stati elettronici.

Struttura Molecolare (18 ore)

Simmetria molecolare e teoria dei gruppi. Introduzione alla struttura molecolare: separazione dei moti elettronici e nucleari, definizione e caratterizzazione della superficie di energia potenziale. La risoluzione del problema elettronico: principi di base della teoria degli orbitali molecolari e della teoria del legame di valenza. Classificazione e costruzione qualitativa degli orbitali molecolari, metodo di Hückel, configurazioni elettroniche, stati elettronici e simboli di termine. Panoramica sui metodi ab initio, semiempirici e DFT per il calcolo della struttura e delle proprietà molecolari.

METODI DIDATTICI

Lezioni teoriche frontali.

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Esame orale

TESTI DI RIFERIMENTO E DI APPROFONDIMENTO, MATERIALE DIDATTICO ON-LINE

- *Materiali didattico on line* (<https://cloud.unibas.it/index.php/s/q88gKe6KeOj9SQK>)
 - *Testo di riferimento*
P. W. Atkins, P.W e Friedman,R. (2000), Meccanica Quantistica Molecolare. Zanichelli..
 - *Testi di approfondimento:*
Cohen-Tannoudji, C.; Diu, B. and Laloe, F. (1977), Quantum Mechanics. Vol. 1 e 2, Wiley
Feynman, R. P.; Leighton, R. B. e Sands, M. (2007), La fisica di Feynman. Vol 3:Meccanica Quantistica, Zanichelli.
Piela, L. (2013), Ideas of Quantum Chemistry,II Edition, Elsevier.
Rigamonti, A. and Carretta, P. (2015), Structure of Matter: An Introductory Course with Problems and Solutions: III Edition, Springer.
-

METODI E MODALITÀ DI GESTIONE DEI RAPPORTI CON GLI STUDENTI

All'inizio del corso, dopo aver descritto obiettivi, programma e metodi di verifica, il docente mette a disposizione degli studenti il materiale didattico (<https://cloud.unibas.it/index.php/s/g88gKe6KeOj9SQK>). Contestualmente, si raccoglie l'elenco degli studenti che intendono iscriversi al corso, corredato di nome, cognome, matricola, e-mail ed eventualmente numero di cellulare.

Orario di ricevimento: il lunedì dalle 13 alle 15 presso studio 3D-103B e il martedì dalle 13 alle 15 presso studio 3D-103B.

Oltre all'orario di ricevimento settimanale, il docente è disponibile in ogni momento per un contatto con gli studenti, attraverso la propria e-mail o il cellulare di servizio .

DATE DI ESAME PREVISTE¹

10/01/2017, 07/2/2017 , 07/03/2017, 30/05/2017, 27/06/2017, 25/07/2017, 12/09/2017, 03/10/2017, 19/12/2017.

SEMINARI DI ESPERTI ESTERNI SI NO

ALTRE INFORMAZIONI

¹ Potrebbero subire variazioni: consultare la pagina web del docente o del Dipartimento/Scuola per eventuali aggiornamenti