

INSEGNAMENTO/MODULO CHIMICA FISICA II

ANNO ACCADEMICO: **2017-2018**

TIPOLOGIA DI ATTIVITÀ FORMATIVA: attività caratterizzante

DOCENTE: CAMILLA MINICHINO

e-mail: camilla.minichino@unibas.it

sito web: scienze.unibas.it/site/home.html.

telefono: 0971/20216158

cell. 3204371123

Lingua di insegnamento: italiano

n. CFU: 6

(6 di lezione e 0 di
esercitazioni/laboratorio)

n. ore: 48

(di 48 lezione e 0 di
esercitazione/laboratorio)Sede: **Potenza**

Dipartimento/Scuola:

Dipartimento di Scienze

CdS

2 Semestre:**dal 05/03/2018 al
15-30 giugno 2018****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/g88gKe6KeOj9SQK>)
 - *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.

Il docente di solito riceve gli studenti presso il proprio studio (3D-103B) il lunedì e il mercoledì dalle 13 alle 15 o in altri giorni e orari da concordare tramite e-mail o cellulare.

DATE DI ESAME PREVISTE¹

15/01/2018, 19/02/18, 12/03/2018, 16/04/2018, 21/05/2018, 11/06/2018, 23/07/2018, 10/09/2018,
08/10/2018,17/12/2018

SEMINARI DI ESPERTI ESTERNI SI NO

ALTRE INFORMAZIONI
