

INSEGNAMENTO/MODULO CHIMICA FISICA II

ANNO ACCADEMICO: **2018-2019**

TIPOLOGIA DI ATTIVITÀ FORMATIVA: attività caratterizzante

DOCENTE: CAMILLA MINICHINO

e-mail: camilla.minichino@unibas.it

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

telefono: 0971/206158

cell.

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 01.03.2019 al
31 maggio - 30
giugno 2019****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) capire il percorso formale e concettuale per caratterizzare gli stati elettronici di atomi e 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**

Origini della teoria quantistica. Postulati e principi fondamentali di meccanica quantistica nella rappresentazione delle coordinate di Schrödinger. L'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo 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

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

Struttura Molecolare

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.

METODI DIDATTICI

- Lezioni teoriche frontali.

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Esame orale

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

- Appunti e presentazioni del corso (<https://cloud.unibas.it/index.php/s/OXiqhrCnlTYUouC>)
- *Testo di riferimento*
P. W. Atkins e R. Friedman. *Meccanica Quantistica Molecolare*, Zanichelli (2000).

○ *Testi di approfondimento:*

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

R.P. Feynman, R.P.; R.B. Leighton, e M. Sands. *La fisica di Feynman. Vol3: Meccanica Quantistica, Zanichelli (2007).*

L. Piela. *Ideas of Quantum Chemistry*, II Edition, Elsevier (2013).

A. Balzarotti, M. Cini e M. Fanfoni. *Atomi, Molecole e Solidi, Esercizi Risolti*, Seconda Edizione, Springer (2018).

METODI E MODALITÀ DI GESTIONE DEI RAPPORTI CON GLI STUDENTI

All'inizio del corso, dopo aver descritto obiettivi, programma dettagliato e metodi di verifica, il docente mette a disposizione il materiale didattico su cd o pendrive e comunica la password per accedere al sito (<https://cloud.unibas.it/index.php/s/OXiqhrCnITYUouC>) su cui viene depositato, con eventuali aggiornamenti. Inoltre raccoglie l'elenco degli studenti, corredato di nome, cognome, matricola, e-mail e (eventualmente) numero di cellulare e ricorda di essere sempre disponibile per informazioni, chiarimenti o aiuto.

Il docente di solito riceve gli studenti presso il proprio studio (3D-103B) il lunedì e il mercoledì dalle 11 alle 13 (si prega di informarlo prima) o in altri giorni e orari da concordare.

DATE DI ESAME PREVISTE¹

21/01/2019, 18/02/2019, 11/03/2019, 15/04/2019, 20/05/2019, 10/06/2019, 01/07/2019, 22/07/2019, 09/09/2019, 07/10/2019, 16/12/2019.

SEMINARI DI ESPERTI ESTERNI SI NO

ALTRE INFORMAZIONI

Frequenza non obbligatoria, ma fortemente raccomandata.
