

INSEGNAMENTO/MODULO CHIMICA FISICA IIANNO ACCADEMICO: **2019-2020**TIPOLOGIA DI ATTIVITÀ FORMATIVA: **CARATTERIZZANTE**DOCENTE: **Camilla Minichino**e-mail: camilla.minichino@unibas.itsito 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 Chimica L 27****Semestre: 2****Dal 02.03.2020 al
31 maggio - 20
giugno 2020****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:

- aver padronanza dei principi e dei metodi elementari della meccanica quantistica,
- conoscere i modelli che sono alla base della teoria del legame chimico e della spettroscopia molecolare,
- capire il percorso formale e concettuale per caratterizzare gli stati elettronici di atomi e molecole,
- essere in grado di risolvere in maniera qualitativa e quantitativa semplici problemi di meccanica quantistica applicata alla chimica,
- saper interpretare osservabili sperimentali in termini di proprietà molecolari,
- riuscire ad integrare gli strumenti formali della meccanica quantistica con i concetti acquisiti nei corsi precedenti in modo da ottenere un quadro coerente e solido di conoscenze di base in ambito chimico,
- essere capace di organizzare sistematicamente le conoscenze acquisite ed esprimerle utilizzando la terminologia corretta.

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. Postulati e principi fondamentali di meccanica quantistica nella rappresentazione delle coordinate e cenni sulla formulazione di Dirac. L'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo in potenziali a segmenti costanti e sue applicazioni in chimica. Una breve Introduzione sull'interazione radiazione-materia e il significato del momento di transizione. L'oscillatore armonico e le vibrazioni molecolari. Il momento angolare orbitale ed il modello spettroscopico del rotatore rigido. Atomi idrogenoidi. Metodo variazionale e teoria perturbativa indipendente dal tempo. Momento angolare generalizzato, spin, composizione di momenti angolari, momenti magnetici ed accoppiamento spin-orbita. Struttura fine degli atomi idrogenoidi. Sistemi con più particelle identiche e postulato di simmetrizzazione/antisimmetrizzazione.

Struttura Atomica (10 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 di momenti angolari e stati elettronici.

Struttura Molecolare (14 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.

METODI DIDATTICI

Lezioni in aula con la presentazione e la discussione dei singoli capitoli del programma dell'insegnamento.

Sessioni facoltative di tutorato per chiarimenti e discussioni sul contenuto delle lezioni anche mediante lo svolgimento di esercizi.

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Esame orale teso ad accertare a) la conoscenza metodologica di tipo generale e saperla applicare a semplici casi specifici, b) la capacità di organizzazione autonoma dell'esposizione ricorrendo alla terminologia corretta.

Prove periodiche facoltative per l'autovalutazione da parte degli studenti del livello di acquisizione della materia del corso.

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

- Appunti e presentazioni del corso (<https://cloud.unibas.it/index.php/s/bQUHfxc42JARX87> e/o <https://elearning.unibas.it/>)
- *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 comunica la password per accedere al sito su cui viene depositato il materiale didattico. 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 ricevimento studenti si svolge di norma il martedì ed il mercoledì dalle 11 alle 13 presso lo studio 3D-103B (essendo possibili variazioni, in corrispondenza di impegni ufficiali/istituzionali, si prega di contattare prima il docente via e-mail) ed in altri giorni/orari da concordare.

DATE DI ESAME PREVISTE¹

21/01/2020, 04/02/2020, 20/02/2020, 03/03/2020, 26/05/2020, 09/06/2020, 07/07/2020, 21/07/2020, 15/09/2020, 06/10/2020, 15/12/2020.

SEMINARI DI ESPERTI ESTERNI SI NO

ALTRE INFORMAZIONI

Frequenza non obbligatoria, ma fortemente raccomandata

¹Potrebbero subire variazioni: consultare <https://unibas.esse3.cineca.it/ListaAppelliOfferta.do?jsessionid=> per eventuali aggiornamenti