

CORSO DI STUDIO: Chimica L-27
ANNO ACCADEMICO : 2024-2025
DENOMINAZIONE DELL'INSEGNAMENTO: CHIMICA FISICA II

Principali informazioni sull'insegnamento	
Anno di corso	II anno
Periodo di erogazione	II semestre (03-03-2025 20-06-2025)
Crediti formativi universitari (CFU/ETCS):	6
SSD	CHEM-02
Lingua di erogazione	Italiano
Modalità di frequenza	facoltativa

Docente	
Nome e cognome	Lucia Catucci
Indirizzo mail	lucia.catucci@uniba.it
Telefono	080-5442055
Sede	Dipartimento di Chimica
Sede virtuale	Piattaforma Microsoft Teams, codice corso taq8brr
Ricevimento	Su appuntamento, da concordare via e-mail

Organizzazione della didattica			
Ore			
Totali	Didattica frontale	Pratica (laboratorio, campo, esercitazione, altro)	Studio individuale
150	40	15	95
CFU/ETCS			
6	5	1	

Obiettivi formativi	Il corso intende fornire agli studenti i fondamenti della teoria quantistica, della spettroscopia molecolare della cinetica chimica con lo scopo di trasmettere le conoscenze e gli strumenti necessari per affrontare e risolvere problematiche inerenti alla chimica fisica
Prerequisiti	Conoscenze di base di Chimica Generale ed Inorganica, Matematica e Fisica

Metodi didattici	Il corso prevede lezioni frontali con il supporto di presentazioni PowerPoint (che saranno disponibili su teams) ed esercitazioni in aula.
-------------------------	--

Risultati di apprendimento previsti	
DD1 Conoscenza e capacità di comprensione	Conoscenza e comprensione dei principi della teoria quantistica, spettroscopia e della cinetica chimica
DD2 Conoscenza e capacità di comprensione applicate	- Acquisizione di procedure metodologiche per applicazioni della spettroscopia e della cinetica chimica per determinazioni qualitative, quantitative, strutturali e di velocità di reazione -

<p>DD3-5 Competenze trasversali</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Autonomia di giudizio Acquisizione di autonomia nella valutazione e interpretazione di dati sperimentali e nell'impostazione delle strategie di applicazione delle nozioni studiate in ambito termodinamico, spettroscopico e cinetico • Abilità comunicative Capacità di comunicare in forma scritta e orale, in italiano ed in inglese, anche con utilizzo di sistemi multimediali. • Capacità di apprendere in modo autonomo Capacità di recuperare agevolmente le informazioni dalla letteratura, banche dati ed internet. <p>-</p>
<p>Contenuti di insegnamento (Programma)</p>	<p>DALLA FISICA CLASSICA ALLA MECCANICA QUANTISTICA Radiazione del corpo nero Effetto fotoelettrico Spettro atomico dell'idrogeno Proprietà ondulatorie della materia Teoria di Bohr dell'atomo di idrogeno Principio di indeterminazione di Heisenberg MECCANICA QUANTISTICA Introduzione I Postulati della MQ. La funzione d'onda e gli operator hermitiani. Operatori e Commutatori. Moto unidimensionale. La particella libera. La particella nella scatola monodimensionale.. Moto vibrazionale armonico. Moto tridimensionale. La particella nella scatola tridimensionale Operatori momento angolare Il rotatore rigido. L'atomo di idrogeno. Atomi Polielettronici Approssimazione orbitalica L'atomo di elio Principio di esclusione di Pauli Costante di schermo, principio della costruzione a strati, carattere periodico dell'energia di ionizzazione Orbitali del campo autoc coerente Spettri degli atomi polielettronici Stati di singoletto e stati di tripletto Accoppiamento spin-orbita, momento angolare totale Simboli di termine e regole di selezione Effetto dei campi magnetici, effetto Zeeman SPETTROSCOPIA Assorbimento, emissione spontanea e stimolata, coefficienti di Einstein Ampiezza della riga, Risoluzione, Intensità, regole di selezione, rapporto segnale-rumore, legge di Lambert-Beer Spettroscopia rotazionale e vibrazionale Aspetti generali Spettri rotazionali puri, transizioni rotazionali; modello del rotore rigido; modello del rotore non rigido Vibrazioni delle molecole biatomiche e poliatomiche, Modello dell'oscillatore armonico; vibrazioni molecolari anarmoniche; costante di anarmonicità; funzione potenziale di Morse; breakdown dell'approssimazione di Born–Oppenheimer Spettri rotovibrazionali Spettroscopia Raman Spettroscopia Elettronica Transizioni elettroniche, Principio e fattori di Franck-Condon Destino degli stati elettronicamente eccitati: Fluorescenza e Fosforescenza Dissociazione e predissociazione Spettroscopia fotoelettronica Spettroscopia fotoelettronica nell'ultravioletto Spettroscopia fotoelettronica a raggi X Spettroscopia di risonanza magnetica Risonanza magnetica nucleare Energia dei nuclei nel campo magnetico Spostamento chimico: scala dello spostamento chimico, la risonanza di gruppi di nuclei diversi, l'origine delle costanti di schermaggio, contributo locale dei gruppi vicini e del solvente Struttura fine: modalità di accoppiamento, livelli energetici dei sistemi accoppiati, entità delle costanti di accoppiamento, origine dell'accoppiamento spin-spin, nuclei equivalenti, spin diluiti e spin abbondanti, disaccoppiamento degli spin. Risonanza di spin elettronico Valore di g Struttura iperfine</p>

	<p>CINETICA CHIMICA E DINAMICA DI REAZIONE MOLECOLARE</p> <p>Definizione di velocità di reazione Leggi cinetiche e costanti cinetiche Ordine di reazione</p> <p>Determinazione dell'equazione cinetica Metodo delle velocità iniziali Equazioni cinetiche integrate Meccanismo di reazione Approssimazione dello stato stazionario Il pre-equilibrio Il meccanismo di Michaelis -Menten Catalisi omogenea ed eterogenea, Adsorbimento. Dipendenza della velocità di reazione dalla temperatura Teoria degli urti Teoria del complesso attivato</p>
Testi di riferimento	"Chimica Fisica" Terza edizione italiana, Peter W. Atkins – Zanichelli
Note ai testi di riferimento	Sito web della Casa Editrice
Materiali didattici	Il materiale didattico è disponibile sulla classe Teams "Chimica Fisica A.A. 2024-2025" codice taq8br

Valutazione	
Modalità di verifica dell'apprendimento	Esame orale
Criteri di valutazione	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Conoscenza e capacità di comprensione:</i> Lo studente deve dimostrare di aver acquisito i concetti della meccanica quantistica, della cinetica chimica e spettroscopia per raggiungere le competenze necessarie per lo studio delle discipline previste dal corso di laurea. • <i>Conoscenza e capacità di comprensione applicate:</i> Lo studente deve essere in grado di applicare le conoscenze chimico fisiche nella soluzione degli esercizi proposti. • <i>Autonomia di giudizio:</i> Lo studente dovrà dimostrare di padroneggiare i principi chimico fisici di base • <i>Abilità comunicative:</i> Lo studente deve sapersi esprimere in forma scritta e orale, in modo chiaro e rigoroso. • <i>Capacità di apprendere:</i> Lo studente deve dimostrare di aver acquisito in maniera critica le nozioni fondamentali e di essere in grado di individuare interconnessioni ed applicazioni dei concetti acquisiti a contesti reali
Criteri di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale	Oltre all'accertamento dell'acquisizione delle nozioni viene valutata l'autonomia di giudizio e la capacità di argomentazione ed esposizione. Il voto finale è attribuito in trentesimi. L'esame si intende superato quando il voto è maggiore o uguale a 18.
Altro	.

