

PARTE A CURA DELLA U.O. DIDATTICA E SERVIZI AGLI STUDENTI

Principali informazioni sull'insegnamento	
Denominazione insegnamento	CHIMICA FISICA II
Corso di studio	Scienze Chimiche
Classe di laurea	LT-27
Crediti formativi (CFU)	6
Obbligo di frequenza	Si
Lingua di erogazione	italiano
Anno Accademico	2018/2019

Docente responsabile	
Nome e Cognome	Lucia Catucci
indirizzo mail	lucia.catucci@uniba.it
telefono	080-5442055

Dettaglio insegnamento	Ambito disciplinare	SSD	tipologia attività
			CHIM/02

Erogazione insegnamento	Anno di corso	Semestre
	II	II

Modalità erogazione	CFU lez	Ore lez	CFU lab	Ore lab	CFU eserc	Ore eserc	CFU eserc campo	Ore eserc campo
	5	40	0	0	1	15	0	0

Organizzazione della didattica	ore totali	ore insegnamento	ore studio individuale
	150	55	95

Calendario	Inizio attività didattiche	Fine attività didattiche

PARTE A CURA DEL DOCENTE

Syllabus	
Prerequisiti	Conoscenze di base della Chimica Generale, della Chimica Fisica e della Fisica
<b>Risultati di apprendimento attesi</b> (declinare rispetto ai Descrittori di Dublino) (si raccomanda che siano coerenti con i risultati di apprendimento del CdS, riportati nei quadri A4a, A4b e A4c della SUA, compreso i risultati di apprendimento trasversali)	
Conoscenza e capacità di comprensione	Conoscenza e comprensione dei principi della meccanica quantistica della spettroscopia e della cinetica chimica
Capacità di applicare conoscenza e comprensione	Acquisizione di procedure metodologiche ad ampio spettro per applicazioni della spettroscopia e della cinetica chimica per determinazioni qualitative, quantitative, strutturali e di velocità di reazione
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 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 apprendimento	Capacità di recuperare agevolmente le informazioni dalla letteratura, banche dati ed internet.

Programma	
Contenuti dell'insegnamento	<p><b>DALLA FISICA CLASSICA ALLA MECCANICA QUANTISTICA</b>  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</p> <p><b>MECCANICA QUANTISTICA</b>  Introduzione I Postulati della MQ. La funzione d'onda e gli operatori 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 auto 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</p> <p><b>SPETTROSCOPIA</b>  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><b>CINETICA CHIMICA E DINAMICA DI REAZIONE MOLECOLARE</b>  Definizione di velocità di reazione Leggi cinetiche e costanti cinetiche Ordine di reazione 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 Dipendenza della velocità di reazione dalla temperatura Teoria degli urti Teoria del complesso attivato</p>
Testi di riferimento	<p>“Chimica Fisica” Terza edizione italiana, Peter W. Atkins – Zanichelli</p> <p>Dispense ed appunti di lezione.</p>
Note ai testi di riferimento	Sono disponibili come supporto i PowerPoint delle lezioni -
Metodi didattici	Lezione frontali mediante impiego di powerpoint
Metodi di valutazione <i>(indicare almeno la tipologia scritto, orale, altro)</i>	Colloquio orale ed impiego di lavagna tradizionale
Criteri di valutazione <i>(per ogni risultato di apprendimento atteso su indicato, descrivere cosa ci si aspetta lo studente conosca o sia in grado di fare e a quale livello al fine di dimostrare che un risultato di apprendimento è stato raggiunto e a quale livello)</i>	Oltre all'accertamento dell'acquisizione delle nozioni, viene valutata la capacità di fare i collegamenti con altre discipline
Altro	