



CHIMICA FISICA II E LABORATORIO A - L

12 CFU - 2° semestre

Docenti titolari dell'insegnamento

ANTONINO LICCIARDELLO - Modulo CHIMICA FISICA II E LABORATORIO (Mod. 1) - CHIM/02 - 6 CFU

Email: alicciardello@unict.it

Edificio / Indirizzo: Viale Andrea Doria, 6 - Edificio 1

Telefono: 0957385086

Orario ricevimento: tutti i giorni, previo appuntamento e-mail o telefonico

GIOVANNI LI DESTRI - Modulo CHIMICA FISICA II E LABORATORIO (Mod. 2) - CHIM/02 - 6 CFU

Email: giolides@unict.it

Edificio / Indirizzo: Dipartimento di Scienze Chimiche, viale A. Doria 6

Telefono: 0957386050

Orario ricevimento: Lun 15:00-17:00 Merc 15:00-17:00

OBIETTIVI FORMATIVI

▪ CHIMICA FISICA II E LABORATORIO (Mod. 1)

Il corso si propone di fornire le conoscenze chimico-fisiche di base per la comprensione del legame chimico, della spettroscopia molecolare e della cinetica chimica. Alla fine del corso lo studente sarà in grado di comprendere i principi di base dei metodi quantomeccanici e spettroscopici e delle loro applicazioni alla determinazione della struttura elettronica e geometrica delle molecole. Conoscerà inoltre le basi della cinetica chimica e delle principali metodologie per lo studio teorico e sperimentale delle reazioni chimiche.

▪ CHIMICA FISICA II E LABORATORIO (Mod. 2)

Il corso ha l'obiettivo di offrire allo studente conoscenze specifiche nel campo della Chimica Fisica.

La formazione è finalizzata principalmente allo sviluppo di conoscenze riguardanti i principi teorici di base da trasferire al livello tecnico/pratico, per mezzo di esperienze di laboratorio opportunamente congegnate.

MODALITÀ DI SVOLGIMENTO DELL'INSEGNAMENTO

▪ CHIMICA FISICA II E LABORATORIO (Mod. 1)

Lezioni frontali ed esercitazioni in aula

▪ CHIMICA FISICA II E LABORATORIO (Mod. 2)

L'insegnamento è strutturato su tre diversi livelli:

- _ Lezioni frontali per l'introduzione alle esperienze di laboratorio
- _ Attività di laboratorio
- _ Esercitazioni al PC per il trattamento e l'interpretazione dei dati sperimentali

PREREQUISITI RICHIESTI

▪ **CHIMICA FISICA II E LABORATORIO (Mod. 1)**

Conoscenze di base di matematica, fisica (meccanica classica, elettromagnetismo, ottica), chimica generale

▪ **CHIMICA FISICA II E LABORATORIO (Mod. 2)**

Conoscenze di base di chimica, fisica e matematica.

FREQUENZA LEZIONI

▪ **CHIMICA FISICA II E LABORATORIO (Mod. 1)**

La frequenza ai corsi è di norma obbligatoria.

Esenzioni motivate parziali o totali dalla frequenza, oltre a quelle previste dall'art. 27 del Regolamento Didattico di Ateneo, possono essere riconosciute dal Consiglio di Corso di Studi dietro presentazione di istanza motivata e riconosciuta tale dal Consiglio.

▪ **CHIMICA FISICA II E LABORATORIO (Mod. 2)**

La frequenza ai corsi è di norma obbligatoria.

Esenzioni motivate parziali o totali dalla frequenza, oltre a quelle previste dall'art. 27 del Regolamento Didattico di Ateneo, possono essere riconosciute dal Consiglio di Corso di Studi dietro presentazione di istanza motivata e riconosciuta tale dal Consiglio.

CONTENUTI DEL CORSO

▪ **CHIMICA FISICA II E LABORATORIO (Mod. 1)**

I - La descrizione quantistica della struttura di atomi e molecole

- Crisi della fisica classica e nascita della teoria quantistica.
- Postulati della meccanica quantistica. Funzioni d'onda e operatori. Equazione di Schroedinger.
- Applicazione ad alcuni sistemi semplici. Particella in una buca di potenziale unidimensionale. Particella in una buca di potenziale tridimensionale. Effetto tunnel. Oscillatore armonico ed anarmonico. Rotatore rigido.
- L'atomo di idrogeno.
- Gli atomi polielettronici. Metodi approssimati per la risoluzione dell'equazione di Schroedinger: cenni ai metodi perturbativi; il metodo variazionale. L'atomo di elio.

Approssimazione orbitalica. Metodo di Hartree-Fock del campo autocostante. Energia di correlazione. Teoria dell'elettrone indipendente per gli atomi complessi. Principio di Pauli. Aufbau.

- Il legame chimico e le molecole biatomiche. Approssimazione di Born-Oppenheimer. Il metodo degli orbitali molecolari e applicazione alla molecola ione idrogeno. Integrali di sovrapposizione, coulombiano e di scambio e loro contributo alla stabilità del legame chimico. Orbitali molecolari di legame e di antilegame. Molecole biatomiche con più di un elettrone. Struttura elettronica nello schema MO. Orbitali σ e π - Applicazione del metodo di Aufbau per gli orbitali molecolari - Configurazione elettronica e proprietà di molecole biatomiche omonucleari.
- Molecole poliatomiche. Il metodo di Huckel: applicazione alle molecole di etilene, butadiene, ciclobutadiene, benzene. Energia di delocalizzazione. Calcolo delle distribuzioni di carica per un sistema π . Ordine di legame π e totale - Relazione fra ordine di legame e lunghezza di legame. Estensione del metodo di Hückel a composti contenenti eteroatomi. Evidenze sperimentale dell'esistenza degli orbitali molecolari.
- Cenni alla struttura elettronica dei solidi.

II - Interazione radiazione-materia e spettroscopia molecolare

- Principi di base di spettroscopia molecolare. Interazione radiazione-materia. Equazione di Schrödinger dipendente dal tempo. Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo (cenni). Regole di selezione per transizioni radiative. Popolazione degli stati e distribuzione di Boltzmann. Spettroscopie convenzionali e non-convenzionali. Approssimazione di Born-Oppenheimer per le spettroscopie. Molecole biatomiche: separazione dei modi vibrazionali e rotazionali.
- Spettroscopia Rotazionale. Livelli energetici rotazionali e spettri rotazionali di molecole diatomiche. Cenni alla classificazione delle molecole da un punto di vista rotazionale e relativi spettri: rotatori lineari, simmetrici oblati e prolatti, sferici, asimmetrici.
- Spettroscopia vibrazionale. Spettri vibrazionali di molecole biatomiche e regole di selezione secondo il modello dell'oscillatore armonico. Applicazione del modello dell'oscillatore anarmonico - Modi normali di un sistema poliatomico e spettri vibrazionali. Spettri vibro-rotazionali di molecole bi- e triatomiche.
- Spettroscopia elettronica. Transizioni elettroniche in molecole biatomiche e poliatomiche. Regole di selezione. Principio di Franck-Condon e transizioni vibroniche. Spettroscopia di fotoelettroni. Lo spettro di fotoelettroni di CO. Spettri degli idruri degli elementi del VI gruppo. Spettri di fotoelettroni di benzeni sostituiti.
- Gli stati elettronici eccitati. Processi fotofisici. Coefficienti di Einstein, emissione spontanea ed emissione stimolata. Spettroscopia di fluorescenza. I laser e la spettroscopia laser. Processi fotochimici.

III - Cinetica chimica

- La velocità delle reazioni chimiche. Leggi cinetiche semplici e costanti cinetiche. Integrazione di equazioni cinetiche semplici. Dipendenza della velocità di reazione dalla temperatura. Meccanismi di reazione. Reazioni elementari. Reazioni consecutive e parallele. Principio del bilancio dettagliato. Approssimazione dello stato stazionario. Reazioni complesse. Cinetica enzimatica.
- La dinamica delle reazioni. Teoria degli urti: sfera di collisione, sezione d'urto, energia degli urti e fattore sterico. Teoria dello stato di transizione. Lo studio sperimentale degli urti

molecolari. Distribuzione angolare e delle velocità dei prodotti di reazione. Meccanismi di rimbalzo, di stripping e con formazione di complesso. Superfici di energia potenziale. Lo studio delle reazioni ultraveloci: femtochimica.

▪ **CHIMICA FISICA II E LABORATORIO (Mod. 2)**

Contenuti: Sicurezza in laboratorio, Analisi ed interpretazione dei dati sperimentali con cenni alla teoria degli errori, Cinetica chimica, Introduzione alla spettroscopia, Introduzione alla termodinamica delle superfici ed interfacce

Esperienze di laboratorio: Cinetica della iodurazione dell'acetone, Cinetica di idrolisi dell'acetato di etile, Verifica della legge di Stern-Volmer, Spettri FT-IR di composti carbonilici in fase solida e liquida, Spettro elettronico di assorbimento dello iodio, Spettro elettronico di assorbimento di polieni coniugati, Calcolo dell' energia libera di superficie, Isotherme di Langmuir

TESTI DI RIFERIMENTO

▪ **CHIMICA FISICA II E LABORATORIO (Mod. 1)**

- D.A. McQuarrie, J.D. Simon - Chimica Fisica- Un approccio molecolare, Zanichelli
- G.K.Vemulapalli - Chimica Fisica - Edises
- P.W.Atkins, J. de Paula - Chimica Fisica - Zanichelli
- P.W.Atkins, R.S.Friedman - Meccanica quantistica molecolare - Zanichelli
- J.M. Hollas, Modern spectroscopy - Wiley
- Appunti, lucidi delle lezioni e ulteriore materiale didattico fornito dal docente

Si sottolinea che lo studente è libero di utilizzare, in alternativa o in aggiunta ai testi proposti, qualunque altro testo di chimica fisica e di spettroscopia molecolare di livello universitario.

▪ **CHIMICA FISICA II E LABORATORIO (Mod. 2)**

1. Appunti e Dispense delle Lezioni
2. Chimica fisica, Libro di Julio De Paula e Peter Atkins, Zanichelli
3. J.R.taylor - Introduzione All'Analisi Degli Errori

ALTRO MATERIALE DIDATTICO

▪ **CHIMICA FISICA II E LABORATORIO (Mod. 1)**

Il link al materiale didattico verrà fornito durante le lezioni

▪ **CHIMICA FISICA II E LABORATORIO (Mod. 2)**

Gli studenti possono trovare il materiale didattico sul sito Studium relativo al corso.

Gli studenti, in accordo con il programma e con le tipologie di esperienze svolte nel corso, possono servirsi del supporto di qualsiasi testo ritengano opportuno.

PROGRAMMAZIONE DEL CORSO

CHIMICA FISICA II E LABORATORIO (Mod. 1)

Argomenti	Riferimenti testi
1 La descrizione quantistica della struttura di atomi e molecole	vedi sezione relativa ai testi di riferimento
2 Interazione radiazione-materia e spettroscopia molecolare	vedi sezione relativa ai testi di riferimento
3 Cinetica chimica	vedi sezione relativa ai testi di riferimento

VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

▪ CHIMICA FISICA II E LABORATORIO (Mod. 1)

L'esame, integrato con quello di laboratorio (modulo 2), è teso ad accertare (a) l'acquisizione dei concetti di base del corso e la capacità di collegarli tra loro e con gli esperimenti svolti in laboratorio; (b) la capacità di esporre chiaramente i concetti usando usando adeguatamente il linguaggio scientifico, (c) la capacità di utilizzare e interpretare quantitativamente i dati sperimentali applicando i concetti e le metodologie acquisiti durante il corso.

L'esame prevede una pre-selezione, costituita da una prova scritta atta a valutare l'acquisizione dei concetti di base minimi riguardanti le tre sezioni del programma, e la capacità di applicarli alla risoluzione di semplici problemi, di tipologia analoga a quelli svolti durante il corso. La prova orale verterà sia sulla discussione di un'esperienza di laboratorio che su argomenti del corso teorico.

▪ CHIMICA FISICA II E LABORATORIO (Mod. 2)

L'esame, integrato con il modulo 1, è teso ad accertare (a) l'acquisizione dei concetti di base del corso e la capacità di collegarli tra loro e con gli esperimenti svolti in laboratorio; (b) la capacità di esporre chiaramente i concetti usando usando adeguatamente il linguaggio scientifico, (c) la capacità di utilizzare e interpretare quantitativamente i dati sperimentali applicando i concetti e le metodologie acquisiti durante il corso.

L'esame prevede una pre-selezione, costituita da una prova scritta atta a valutare l'acquisizione dei concetti di base minimi riguardanti le tre sezioni del programma, e la capacità di applicarli alla risoluzione di semplici problemi, di tipologia analoga a quelli svolti durante il corso. La prova orale verterà sia sulla discussione di un'esperienza di laboratorio che su argomenti del corso teorico.

ESEMPI DI DOMANDE E/O ESERCIZI FREQUENTI

▪ CHIMICA FISICA II E LABORATORIO (Mod. 1)

Esempi di esercizi numerici:

Calcolare la costante di forza di una molecola biatomica nota la frequenza di assorbimento nell'IR

Calcolare la differenza di energia tra due livelli in un sistema assimilabile ad una buca di potenziale unidimensionale

Esempi di domande:

Il metodo del campo auto coerente

La molecola ione idrogeno

L'approssimazione di Born-Oppenheimer

Evidenze sperimentali del meccanismo con formazione di complesso in una reazione in fase gassosa.

▪ **CHIMICA FISICA II E LABORATORIO (Mod. 2)**

_Descrivere le procedure di laboratorio atte alla verifica della legge di Stern Volmer

_Quale è la relazione tra la bagnabilità della superficie e la sua energia libera?

_Cosa si intende per transizione permessa?

_Descrivere l'andamento dello spettro di assorbimento nel visibile dello I₂ e motivarlo da un punto di vista teorico.
