

## COURSE SYLLABUS

### Physical Chemistry II

2021-2-E2702Q089-E2702Q090M

---

#### Obiettivi

L'insegnamento si propone di fornire:

- conoscenza e capacità di comprensione della cinetica delle reazioni chimiche e di elementi introduttivi alla chimica quantistica, attraverso le lezioni frontali.
- capacità di applicare i principi di cinetica, mediante numerosi esempi presentati a lezione e le esercitazioni in aula.
- autonomia di giudizio, mediante l'analisi di problemi di cinetica e la discussione e selezione delle soluzioni.
- abilità comunicative, attraverso la partecipazione attiva a lezioni ed esercitazioni e l'esame orale.
- capacità di apprendere, stimolata dal costante sforzo di riprendere e integrare le conoscenze pregresse di matematica, fisica e chimica, utili per l'analisi della struttura, proprietà e reattività chimiche.

#### Contenuti sintetici

*Cinetica chimica:* Studio della velocità di reazione ed equazioni cinetiche. Meccanismi di reazione. Effetti della temperatura. Catalisi.

*Chimica quantistica:* Introduzione alla meccanica quantistica. Applicazioni della chimica quantistica a sistemi modello, ad atomi e a molecole.

## Programma esteso

### *Cinetica chimica:*

- Velocità di reazione ed equazioni cinetiche. Esperimenti cinetici.
- Metodi per determinare l'ordine di reazione e la costante di velocità.
- Stadi elementari e meccanismi a più stadi. Individuazione del meccanismo di reazione.
- Coordinata di reazione, stato di transizione e parametri di attivazione
- Equazioni di Arrhenius e di Eyring.
- Catalisi; equazione di Michaelis-Menten.

### *Chimica quantistica:*

- Insufficienze della fisica classica per lo studio dei sistemi microscopici. Dalla meccanica classica alla meccanica quantistica.
- Applicazione della meccanica quantistica a sistemi modello (singola particella soggetta a moto traslazionale, vibrazionale e rotazionale vincolati).
- Introduzione all'applicazione della meccanica quantistica allo studio della struttura atomica (sistemi idrogenoidi e atomi polielettronici).
- Introduzione all'applicazione della meccanica quantistica allo studio della struttura molecolare (molecole biatomiche).

## Prerequisiti

Conoscenze dei fondamenti della chimica generale, inorganica e organica. Conoscenze di base di matematica.

Non sono previste propedeuticità con altri insegnamenti, ma è consigliato aver superato gli esami del primo anno e l'esame di Chimica Fisica I.

## Modalità didattica

Lezioni frontali, 7 CFU

Esercitazioni in aula, 2 CFU

Nel periodo di emergenza Covid-19 le lezioni e le esercitazioni si svolgeranno in modalità da remoto asincrono con eventi in videoconferenza sincrona.

## Materiale didattico

Nella pagina e-learning dell'insegnamento sono fornite: le slides presentate durante le lezioni; alcuni esercizi con soluzioni per la preparazione individuale all'esame scritto.

Testo consigliato: P. Atkins, J. de Paula, Chimica Fisica, 5<sup>a</sup> ed. italiana, condotta sulla 9<sup>a</sup> ed. inglese, Zanichelli Editore

## **Periodo di erogazione dell'insegnamento**

Secondo semestre

## **Modalità di verifica del profitto e valutazione**

La verifica del modulo Chimica Fisica II si compone di una prova scritta e di una prova orale. Le due prove possono essere effettuate in appelli differenti.

***La prova scritta riguarda la soluzione di problemi di cinetica delle reazioni chimiche e ha l'obiettivo di verificare le conoscenze acquisite, la capacità di applicare tali conoscenze alle soluzioni di problemi, e la capacità di giudizio. La prova viene valutata con uno dei seguenti giudizi: OTTIMO, BUONO, DISCRETO, SUFFICIENTE, NON AMMESSO. Chi supera la prova scritta (esito almeno SUFFICIENTE) è ammesso all'orale. La prova scritta è mantenuta valida per 6 mesi.***

***La prova orale*** prevede una breve discussione sullo scritto e un colloquio su tutti gli argomenti svolti a lezione (Cinetica e fondamenti di Chimica Quantistica). Ha l'obiettivo di verificare le conoscenze e la comprensione del programma d'esame e le abilità comunicative.

Nel periodo di emergenza Covid-19 entrambe le prove potranno essere svolte utilizzando la piattaforma WebEx e nella pagina e-learning dell'insegnamento verrà riportato un link pubblico per l'accesso all'esame di possibili spettatori virtuali.

Il voto in trentesimi (18-30/30) per il modulo di Chimica Fisica II deriva dall'integrazione del giudizio dello scritto e del voto dell'orale.

Il voto finale in trentesimi (18-30/30) dell'insegnamento "Chimica Fisica II e Laboratorio" deriva dalla media pesata dei voti dei moduli di Chimica Fisica II e Laboratorio di Chimica Fisica.

## **Orario di ricevimento**

Ricevimento previo appuntamento via e-mail

---