

Anno Accademico 2014/2015

Corso di Chimica Fisica II

Prof. Riccardo Basosi

Il corso si propone di fornire informazioni sulle interazioni tra energia e materia dal livello microscopico a quello macroscopico proponendo i concetti fondamentali della meccanica quantistica e della termodinamica.

### Meccanica Quantistica

Limiti della meccanica classica e introduzione alla meccanica quantistica. Atomo di Bohr. Formulazioni del principio di indeterminazione di Heisenberg. Proprietà degli operatori. Autovalori ed autofunzioni. Equazione agli autovalori. Postulati della meccanica quantistica: I e II postulato. Funzioni orbitali, Hamiltoniani. Postulati della meccanica quantistica: III, IV e V postulato. Equazione di Schrödinger. Energia continua e positiva: particella libera. Quantizzazione dell'energia: particella nella scatola. Orbitali atomici e significato dei numeri quantici: atomo di idrogeno. Il principio di Pauli. Il metodo variazionale: atomo di elio. La teoria del legame chimico. Metodo dell'orbitale molecolare (LCAO): molecola ione idrogeno. Orbitali ibridi. Confronto con il metodo del legame di valenza: molecola di idrogeno. Molecole omopolari e eteropolari.

### Termodinamica

Energia, entropia e concetti fondamentali della termodinamica. I e II Principio della TD. Lavoro e calore. Funzioni di stato. Sistemi termodinamici: isolati, chiusi e aperti. Equilibrio. Differenziali esatti e non esatti. Relazione di chiusura. Variazioni e quantità infinitesime. Flussi, cicli termodinamici e macchine termiche. Pompe di calore e frigoriferi. Capacità termiche. Altre funzioni termodinamiche (entalpia ed energie libere di Gibbs e di Helmholtz). Trasformazioni di Legendre. Relazione tra le derivate per i sistemi a due variabili indipendenti.

### Testi di riferimento:

- P. W. Atkins, Julio de Paula *Chimica Fisica*, Ed. Zanichelli Luglio 2012.

- M. W. Hanna, *Chimica e Meccanica Quantistica*, Ed. Ambrosiana.
- M. M. Abbott, H. C. Van Ness, *Termodinamica*, Ed. ETAS (Schaum).

Le dispense del corso saranno disponibili dopo la lezione alla pagina web :

<http://www.chim.unisi.it/basosi/didattica/intro.html>

**\*Ipotesi di Programma, come specificato dal Professore a lezione. Il programma reale sarà alla fine costituito esclusivamente dagli argomenti che il Professore avrà effettivamente trattato a lezione.**