

Insegnamento: CHIMICA FISICA APPLICATA/ APPLIED CHEMICAL PHYSICS			
SSD: CHIM/02	CFU: 6	Lezione: 30 ore	Esercitazione: 18 ore
Tipologia attività formativa: scelta		Durata del corso: semestrale	
Obiettivi formativi e risultati dell'apprendimento attesi: Il corso propone diversi concetti di base della chimica-fisica e la loro applicazione a tematiche generali quali la reattività fotocatalisi e la conversione di energia, con particolare attenzione a materiali e dispositivi tecnologici. Al termine del corso lo studente sarà in grado di individuare le relazioni tra le proprietà strutturali ed elettroniche e il funzionamento di sistemi molecolari complessi e di materiali eterogenei funzionali. Sarà inoltre in grado di sviluppare le conoscenze critiche per la simulazione e il design di nuovi materiali a partire dal calcolo delle loro proprietà chimicofisiche. Il corso prevede delle esperienze obbligatorie di laboratorio computazionale			
Programma sintetico: - Introduzione Il ruolo della chimica fisica nelle scienze e tecnologie moderne. Molecole, Materiali e Dispositivi. Il paradigma della conversione dell'energia e dell'efficienza energetica. - Elementi di chimica computazionale Teoria, modello e simulazione. Meccanica molecolare e simulazione di sistemi molecolari complessi. Metodi ab initio e calcolo di proprietà elettroniche in molecole e materiali solidi estesi. - Cinetica chimica e catalisi Richiami di termodinamica chimica. Introduzione alla cinetica chimica. Metodi sperimentali e teorici per lo studio delle reattività chimica. Teoria dello stato stazionario. Catalisi omogenea ed eterogenea. Elettrocatalisi. - Chimica fisica delle energie rinnovabili Lo scenario attuale delle tecnologie rinnovabili. Energia solare: tecnologie fotovoltaiche di terza generazione, celle foto-elettrochimiche per la produzione di idrogeno molecolare e per la riduzione di CO ₂ . Celle a combustibile: processi agli elettrodi, trasporto di carica e di massa in materiali polimerici e ceramici innovativi. Batterie e accumulatori: batterie al litio-ione, litio-zolfo e al sodio-ione, limiti dei dispositivi attuali e sfide tecnologiche.			
Contents - Introduction The role of Physical Chemistry in modern Science and Technology. Molecules, Materials, Devices. The paradigm of energy conversion and efficiency. - Basics of computational chemistry Theory, models and simulations. Molecular mechanics and modeling of complex molecular systems. Ab initio methods and calculation of electronic properties of molecules and extended solid materials. - Chemical kinetics and catalysis Brief review of chemical thermodynamics. Introduction to chemical kinetics. Experimental and theoretical methods for the study of chemical reactivity. Steady-state theory. Homogeneous and heterogeneous catalysis. Electrocatalysis. - Physical Chemistry of renewable energies Current scenario of renewable energy technologies. Solar energy: third-generation photovoltaics, photoelectrochemical cells for hydrogen production and CO ₂ reduction. Fuel cells: processes at the electrodes, charge and mass transport in state-of-the-art polymeric and ceramic materials. Batteries and (super)capacitors: Li-ion, Li-S and Na-ion batteries, limits of current devices and technological challenges.			
Esami propedeutici: nessuno		Anno di corso: secondo	
Prerequisiti: - padroneggiare i contenuti dei corsi di Meccanica e Termodinamica ed Elettromagnetismo; - padroneggiare i contenuti del corso di Chimica.			
Modalità di accertamento del profitto: esame orale			
Materiale didattico: Libri di testo, Sussidi didattici sul sito web-docenti			