



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PALERMO

DIPARTIMENTO	Scienze e Tecnologie Biologiche, Chimiche e Farmaceutiche		
ANNO ACCADEMICO OFFERTA	2021/2022		
ANNO ACCADEMICO EROGAZIONE	2023/2024		
CORSO DILAUREA	CHIMICA		
INSEGNAMENTO	CHIMICA FISICA III CON LABORATORIO		
CODICE INSEGNAMENTO	13737		
MODULI	Si		
NUMERO DI MODULI	2		
SETTORI SCIENTIFICO-DISCIPLINARI	CHIM/02		
DOCENTE RESPONSABILE	CHILLURA MARTINO DELIA FRANCESCA	Professore Ordinario	Univ. di PALERMO
ALTRI DOCENTI	FERRANTE FRANCESCO	Professore Associato	Univ. di PALERMO
	CHILLURA MARTINO DELIA FRANCESCA	Professore Ordinario	Univ. di PALERMO
CFU	11		
PROPEDEUTICITA'	00133 - CHIMICA GENERALE ED INORGANICA 15248 - ESERCITAZIONI DI PREPARAZIONI CHIMICHE CON LABORATORIO		
MUTUAZIONI			
ANNO DI CORSO	3		
PERIODO DELLE LEZIONI	2° semestre		
MODALITA' DI FREQUENZA	Obbligatoria		
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi		
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	CHILLURA MARTINO DELIA FRANCESCA Lunedì 15:00 16:00 Studio Prof. Chillura. Ed. 17 - Viale delle Scienze FERRANTE FRANCESCO Martedì 14:00 18:00 Viale delle Scienze, edificio 17, ufficio P1080 Giovedì 14:00 18:00 Viale delle Scienze, edificio 17, ufficio P1080		

DOCENTE: Prof.ssa DELIA FRANCESCA CHILLURA MARTINO

PREREQUISITI	Concetti di base della fisica classica. Principi della termodinamica classica di sistemi ideali e reali all'equilibrio.
RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI	1. Conoscenza e capacita' di comprensione Acquisizione dei concetti fondamentali di meccanica quantistica e di spettroscopia per la comprensione del legame esistente fra proprieta' microscopiche e macroscopiche della materia. Capacita' di utilizzare il linguaggio specifico proprio della disciplina. Capacita' di costruzione di opportuni modelli teorici per lo studio di proprieta' termodinamiche e strutturali anche in relazione a limitazioni di tipo computazionale. Conoscenza delle leggi che governano le interazioni intermolecolari, delle leggi fondamentali della Termodinamica, della Meccanica Quantistica (MQ) e della Spettroscopia. 2. Capacita' di applicare conoscenza e comprensione Capacita' di riconoscere le caratteristiche essenziali e le specifiche interazioni microscopiche che consentono di interpretare e prevedere il comportamento macroscopico. 3. Autonomia di giudizio Essere in grado di valutare le implicazioni legate ad un approccio modellistico. Capacita' di applicare a problemi specifici le conoscenze delle leggi e dei principi della meccanica quantistica, della termodinamica e della spettroscopia. Capacita' di realizzare esperimenti di termodinamica, cinetica, meccanica quantistica e spettroscopia utilizzando consapevolmente strumentazione scientifica anche avanzata. Capacita' di formulare giudizi autonomi sui problemi scientifici, di effettuare esperimenti e interpretare i dati. 4. Abilita' comunicative Capacita' di esporre, anche ad un pubblico non esperto i limiti e vantaggi di modelli interpretativi alternativi. Essere in grado di sostenere l'importanza dell'uso di modelli microscopici e di specifiche applicazioni. Capacita' di sintesi ed elaborazione chiara e personale dei concetti esaminati 5. Capacita' d'apprendimento Ci si aspetta lo sviluppo calibrato delle capacita' di apprendimento che consentano di affrontare, con un alto grado di autonomia, studi specialistici
VALUTAZIONE DELL'APPRENDIMENTO	Esame orale e discussione delle relazioni di laboratorio. La valutazione viene espressa in trentesimi. Descrizione dei metodi di valutazione: eccellente, 30-30 e lode, ottima conoscenza degli argomenti, ottima proprieta' di linguaggio, buona capacita' analitica, lo studente e' in grado di applicare le conoscenze per risolvere i problemi proposti; molto buono, 26--29, buona padronanza degli argomenti, piena proprieta' di linguaggio, lo studente e' in grado di applicare le conoscenze per risolvere i problemi proposti; buono, 24--25, conoscenza di base dei principali argomenti, discreta proprieta' di linguaggio, con limitata capacita' di applicare autonomamente le conoscenze alla soluzione dei problemi proposti; soddisfacente, 21--23, non ha piena padronanza degli argomenti principali dell'insegnamento ma ne possiede le conoscenze, soddisfacente proprieta' di linguaggio, scarsa capacita' di applicare autonomamente le conoscenze acquisite; sufficiente, 18--20, minima conoscenza di base degli argomenti principali dell'insegnamento e del linguaggio tecnico, scarsissima o nulla capacita' di applicare autonomamente le conoscenze acquisite; insufficiente, non possiede una conoscenza accettabile dei contenuti degli argomenti trattati nell'insegnamento. La valutazione complessiva e' una media pesata per i cfu delle valutazioni riportate nei due moduli.
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali (modulo 1), Esperienze di Laboratorio (modulo 2)

MODULO CHIMICA FISICA III

Prof. FRANCESCO FERRANTE

TESTI CONSIGLIATI

Generale: P. W. Atkins, J. De Paula, Chimica Fisica, Zanichelli

Meccanica quantistica: Dispense fornite dal docente

Termodinamica statistica: D.A. McQuarrie, Statistical Mechanics, Harper & Row

Spettroscopia: J. M. Hollas, Modern Spectroscopy, Wiley

TIPO DI ATTIVITA'	B
AMBITO	50135-Discipline chimiche inorganiche e chimico-fisiche
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	136
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITA' DIDATTICHE ASSISTITE	64

OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO

L'obiettivo del corso è fornire agli studenti i concetti teorici fondamentali di meccanica quantistica e di termodinamica statistica, nonché definire il ruolo di queste discipline nell'ambito delle tecniche spettroscopiche. Lo studente acquisirà familiarità con la formulazione assiomatica della meccanica quantistica, con la descrizione quantistica del moto traslazionale, rotazionale e vibrazionale, con la quantizzazione dell'energia e con la definizione di stato quantistico. Imparerà la definizione statistica degli stati di un sistema formato da un elevato numero di particelle, le regole che disciplinano la distribuzione di queste tra i livelli energetici e le connessioni fra proprietà microscopiche e macroscopiche della materia attraverso la funzione di partizione. Sarà in grado di comprendere le regole che determinano la posizione e l'intensità dei picchi in uno spettro, e prevedere come appariranno gli spettri rotazionale e vibrazionale di molecole semplici. Sarà in grado di utilizzare i concetti appresi in altre discipline e nei suoi studi futuri.

PROGRAMMA

ORE	Lezioni
2	Introduzione al corso. Esposizione di programma e contenuti. Libri di testo. Modalità di valutazione dell'esame.
4	Introduzione alla meccanica quantistica. Inadeguatezze della fisica classica: spettro di emissione del corpo nero, capacità termica dei solidi cristallini, effetto fotoelettrico, spettro dell'atomo di idrogeno, diffrazione degli elettroni.
2	Complementi di matematica: gli spazi vettoriali N-dimensionali complessi, le trasformazioni lineari, le equazioni agli autovalori.
4	I postulati della meccanica quantistica. La funzione d'onda e l'interpretazione di Born, gli operatori quantomeccanici, i valori d'attesa di un osservabile, l'equazione di Schroedinger, gli stati stazionari.
8	Risoluzione dell'equazione di Schroedinger per sistemi con potenziale centrosimmetrico. La particella libera, il principio di indeterminazione di Heisenberg, l'effetto tunnel e il suo ruolo nell'interpretazione di alcune evidenze sperimentali. La particella confinata, la quantizzazione dell'energia, la degenerazione dei livelli energetici. Il principio di corrispondenza. Il rotore rigido, la quantizzazione del momento angolare. L'oscillatore armonico. Gli atomi idrogenoidi e gli orbitali atomici.
2	Spiegazione quantistica di fenomeni non interpretabili dalla meccanica classica.
2	Introduzione alla spettroscopia. Lo spettro elettromagnetico e l'interazione tra la radiazione e la materia.
2	L'apparato sperimentale: sorgenti, monocromatori, celle, rivelatori. La legge di Lambert-Beer.
2	La probabilità delle transizioni: il momento di dipolo di transizione e le regole di selezione. L'allargamento di riga.
4	Spettroscopia rotazionale; fattori che influenzano la posizione e l'intensità delle righe. Regole di selezione rotazionali. Simulazione dello spettro rotazionale di una molecola biatomica. Informazioni che si possono ricavare da uno spettro rotazionale.
6	Spettroscopia vibrazionale. Cenni sui modi normali di vibrazione. Regole di selezione vibrazionali. Simulazione dello spettro vibrazionale di una molecola poliatomiche. Spettroscopia IR a trasformata di Fourier.
2	Spettroscopia atomica. Le transizioni responsabili dei colori nei saggi alla fiamma.
2	Spettroscopia elettronica molecolare. Regole di selezione. Fattori di Franck-Condon. Fluorescenza e fosforescenza.
2	Cenni sulle tecniche di diffrazione. L'analisi dell'interazione tra un cristallo e la radiazione X. La legge di Bragg.

8	Lo stato gassoso e le deviazioni dal comportamento ideale. Il fattore di compressibilità. Interazioni intermolecolari: interazioni dipolo-dipolo, dipolo-dipolo indotto e forze di dispersione. L'equazione del viriale e le equazioni di stato empiriche. l'equazione di van der Waals. Transizioni di fase. La regione critica. La legge degli stati corrispondenti.
2	Introduzione alla termodinamica statistica. Connessione fra proprietà macroscopiche e composizione microscopica dei sistemi.
4	Definizione di microstati e macrostati di un sistema. Statistica di Boltzmann. Funzione di partizione e sue proprietà.
6	Definizione di Boltzmann dell'entropia, connessione con il secondo e il terzo principio della termodinamica. Interpretazione statistica degli scambi energetici sotto forma di lavoro e di calore. Espressione statistica delle funzioni termodinamiche.

**MODULO
LABORATORIO DI CHIMICA FISICA III**

Prof.ssa DELIA FRANCESCA CHILLURA MARTINO

TESTI CONSIGLIATI

I testi adottati nei tre corsi teorici di Chimica Fisica
Materiale fornito dal docente

TIPO DI ATTIVITA'	C
AMBITO	10693-Attività formative affini o integrative
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	30
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITA' DIDATTICHE ASSISTITE	45

OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO

Il modulo ha l'obiettivo di applicare i concetti acquisiti nel corso di Chimica Fisica III. Ciascuno studente eseguirà 3 esperimenti. L'approccio seguito è basato sul problem-solving. Le esperienze saranno illustrate collegialmente secondo tale approccio e i risultati saranno discussi collegialmente sulla base di un approccio di didattica circolare.

PROGRAMMA

ORE	Laboratori
5	Introduzione e finalità del modulo. Presentazione del calendario. Modalità di stesura delle relazioni di laboratorio. Richiami sulle norme di sicurezza da rispettare in laboratorio. Illustrazione delle esperienze e descrizione delle apparecchiature scientifiche. Propagazione degli errori.
10	Struttura della materia: determinazione delle dimensioni di particelle disperse in un mezzo solvente mediante scattering dinamico di luce. Alternativamente, basata sulla disponibilità della strumentazione, tale esperienza sarà sostituita con la determinazione della struttura cristallina mediante diffrazione di raggi X. Esecuzione dell'esperienza e stesura della relazione di laboratorio.
10	Struttura della materia: acquisizione e interpretazione di spettri FT-IR in modalità ATR. Esecuzione dell'esperienza e stesura della relazione di laboratorio.
10	Meccanica Quantistica: Calcolo della struttura vibrazionale della prima banda dello spettro elettronico, in assorbimento e in fluorescenza, di una molecola biatomica. Esecuzione dell'esperienza e stesura della relazione di laboratorio.
10	Discussione dei risultati delle esperienze: confronto con i dati di letteratura, analisi critica sul significato dei risultati e sulle loro implicazioni in un contesto di ricerca. Preparazione di un breve powerpoint sulle esperienze condotte e presentazione in aula.