



# UNIVERSITÀ DI PISA

## CHIMICA FISICA II + LABORATORIO

### BENEDETTA MENNUCCI

Academic year	2018/19
Course	CHIMICA
Code	246CC
Credits	15

Modules	Area	Type	Hours	Teacher(s)
CHIMICA FISICA II	CHIM/02	LEZIONI	72	FILIPPO LIPPARINI BENEDETTA MENNUCCI
LABORATORIO DI CHIMICA FISICA II	CHIM/02	LABORATORI	69	DONATA INES MARIA CATALANO

#### Obiettivi di apprendimento

#### Conoscenze

Lo studente che completa il corso con successo:

- Sarà in grado di dimostrare una conoscenza di base dei principi che governano la meccanica quantistica e la sua applicazione alla descrizione della struttura elettronica di atomi e molecole
- Sarà in grado di dimostrare una conoscenza fondamentale dei principi che disciplinano l'assorbimento e l'emissione di radiazioni elettromagnetiche da parte di sistemi atomici e molecolari
- Sarà in grado di collegare le conoscenze quantistiche del mondo microscopico con le leggi termodinamiche che governano il mondo macroscopico
- Avrà la capacità di registrare e analizzare gli spettri IR, UV-Vis, Fluorescenza e NMR.

#### Modalità di verifica delle conoscenze

- Per l'accertamento delle conoscenze saranno svolte delle esercitazioni in aula e prove in itinere
- La verifica delle conoscenze sarà oggetto della valutazione dell'elaborato scritto prodotto alla fine della serie di esperienze di laboratorio

#### Capacità

Al termine del corso:

- Lo studente sarà in grado di presentare in una relazione scritta i risultati dell'attività svolta durante il laboratorio sperimentale e quello computazionale
- Lo studente sarà in grado di discutere una presentazione orale sull'attività svolta durante il corso.

#### Modalità di verifica delle capacità

- Lo studente dovrà preparare e presentare una relazione scritta che riporti i risultati dell'attività svolta durante il laboratorio sperimentale e computazionale.
- Lo studente dovrà preparare e discutere una presentazione orale sull'attività svolta durante il corso

#### Comportamenti

- Lo studente potrà sviluppare la capacità di utilizzare modelli teorici per l'interpretazione di misure sperimentali.
- Lo studente potrà saper gestire l'organizzazione di un lavoro in gruppo.
- Saranno acquisite opportune accuratezza e precisione nello svolgere attività sperimentali.
- Lo studente potrà sviluppare sensibilità alle problematiche di sicurezza in laboratorio.

#### Modalità di verifica dei comportamenti



# UNIVERSITÀ DI PISA

- Durante il corso "teorico", lo studente imparerà ad interpretare i principali processi chimico-fisici sulla base di comportamenti elettronici descrivibili dalla teoria quanto-meccanica.
- Durante le sessioni di laboratorio saranno valutati il grado di accuratezza e precisione delle attività svolte
- Durante il lavoro di gruppo sono verificate le modalità di definizione delle responsabilità, di gestione e organizzazione delle attività
- Saranno richieste agli studenti delle brevi relazioni concernenti gli argomenti trattati nel laboratorio

## Prerequisiti (conoscenze iniziali)

Lo studente dovrebbe possedere:

- conoscenze di base di analisi matematica (in particolare calcolo differenziale e integrale)
- conoscenze di base di algebra lineare (in particolare problemi ad autovalori)
- conoscenze di base di fisica (in particolare leggi del moto ed elettrostatica)
- conoscenze delle leggi della termodinamica classica

Si noti che le necessarie conoscenze qui elencate si considerano formalmente acquisite con il superamento degli esami indicati come propedeutici nel Regolamento Didattico del Corso di Laurea in Chimica. La frequenza al Corso di "Chimica Fisica II e Laboratorio" non è subordinata all'aver già superato gli esami propedeutici suddetti, ma i contenuti fondamentali di tali corsi devono essere noti allo studente perché questi possa seguire il corso in modo proficuo; lo studente deve comunque superare gli esami propedeutici prima di presentarsi all'esame.

## Indicazioni metodologiche

- le lezioni frontali si svolgono con ausilio di slide
- per il laboratorio computazionale si formano gruppi e si usano i PC delle aule informatiche
- il personale di supporto (tecnicici, dottorandi e/o cultori della materia) coadiuva il docente nelle esercitazioni numeriche e nell'assistenza ai laboratori
- il sito di elearning del corso è usato per scaricare materiali didattici, per comunicazioni docente-studenti, per la pubblicazione di test per esercitazioni, per formazione di gruppi di lavoro
- le interazioni tra studente e docente al di fuori delle ore di lezione/laboratorio avvengono attraverso ricevimenti e uso della posta elettronica
- presenza di prove in itinere

## Programma (contenuti dell'insegnamento)

### PARTE TEORICA

- Fondamenti di meccanica quantistica: Origini della meccanica quantistica; equazione di Schrödinger; osservabili e operatori; principio d'indeterminazione; momento angolare orbitale e di spin.
- Struttura atomica e spettri atomici: Atomi idrogenoidi; orbitali atomici; transizioni spettroscopiche e regole di selezione; atomi polielettronici; principio di aufbau e di Pauli; stati di singoletto e di tripletto; termini spettroscopici e regole di selezione.
- Struttura molecolare: Approssimazione di Born-Oppenheimer; teoria dell'orbitale molecolare; principio variazionale; metodo di Hückel; cenni sul metodo Hartree-Fock,
- Simmetria: Elementi di Teoria dei gruppi e sue applicazioni alla chimica quantistica
- Modelli per la simulazione di Spettroscopie Molecolari: Oscillatore armonico e spettroscopia vibrazionale di molecole biatomiche. Modi normali e vibrazioni in molecole poliatomiche. Transizioni elettroniche e dipoli di transizione. Transizioni vibroniche e principio di Franck-Condon. Eccitazioni elettroniche e tempi di decadimento. Regole di selezione per assorbimento e fluorescenza.
- Elementi di termodinamica statistica: Insiemi statistici; la distribuzione di Boltzman; la funzione di partizione e il suo utilizzo per il calcolo delle proprietà termodinamiche e lo studio dell'equilibrio chimico.

### PARTE DI LABORATORIO

- Elementi di ottica geometrica. Interferenza con esempi e applicazioni. Lo spettro elettromagnetico e l'energia della radiazione elettromagnetica. Il corpo nero e la distribuzione di Planck. L'effetto fotoelettrico e le spettroscopie XPS e UV PES.
- Trasmittanza, assorbanza e legge di Lambert e Beer. Assorbimento di radiazione elettromagnetica, emissione stimolata ed emissione spontanea: il modello di Einstein. La distribuzione di Boltzmann.
- Le curve di energia potenziale, la funzione di Morse, l'approssimazione armonica, i livelli energetici vibrazionali. La Legge di Hooke applicata alle molecole biatomiche. Gradi di libertà vibrazionali e spettroscopia IR di molecole bi- e poliatomiche. Spettri vibrorotazionali.
- Le transizioni elettroniche. Il principio di Franck Condon e la sottostruttura vibrazionale negli spettri elettronici di assorbimento e di emissione (fluorescenza e fosorescenza). L'effetto del solvente sulle transizioni elettroniche.
- La larghezza delle righe spettrali.
- Principi di base della spettrometria NMR. Precauzioni essenziali per la registrazione di spettri NMR.
- Registrazione e interpretazione di spettri IR e UV-Vis, di fluorescenza e NMR.

## Bibliografia e materiale didattico

Oltre alle copie delle slides usate nelle lezioni frontali e al materiale didattico disponibile sulla piattaforma elearning del corso, si consigliano argomenti selezionati dai seguenti testi:



# UNIVERSITÀ DI PISA

---

- Chimica fisica: un approccio molecolare, di D. A McQuarrie e J. D. Simon;
- Chimica Fisica, di P. Atkins e J. de Paula;
- Identificazione spettrometrica dei composti organici, di R. M. Silverstein, F. X. Webster e D. J. Kiemle.
- Eventuali ulteriori letture saranno suggerite durante il corso.

## Indicazioni per non frequentanti

- Registrarsi alla pagina E-learning del corso per scaricare le slides/note delle lezioni.
- Prendere contatto all'inizio delle lezioni con il docente del modulo di Laboratorio Spettroscopico per concordare le modalità di accesso al Laboratorio stesso

## Modalità d'esame

Modalità d'esame 'tradizionale':

- L'esame è composto da un prova scritta ed una prova orale. Per accedere alla prova scritta gli studenti devono aver consegnato le relazioni scritte sulle esperienze di laboratorio.
- La prova scritta si consiste in più domande/esercizi da risolvere. La durata è di circa 30 minuti a domanda/esercizio.
- La prova scritta è superata superata se almeno 2/3 degli esercizi sono svolti sufficientemente.
- La prova orale consiste in un colloquio tra il candidato e i due docenti del corso.
- La prova orale non è superata se il candidato non risponde correttamente, esprimendosi in modo chiaro e usando la terminologia corretta, almeno alle domande sui concetti principali presentati nel corso.

Modalità alternativa, riservata agli studenti frequentanti a partire dall'anno 2017-2018:

- Per il modulo teorico: superamento di varie esercitazioni scritte proposte nel corso dell'anno, seguito da una prova orale da sostenere entro la fine dell'anno solare in cui si è frequentata l'ultima parte del corso.
- Per il modulo di laboratorio: compito scritto seguito da una prova orale, se ritenuta necessaria per la valutazione. Per l'ammissione al compito scritto è richiesta la consegna di una relazione personale relativa ad una delle cinque esperienze di laboratorio.

Il voto finale sarà concordato dai docenti alla conclusione di tutte la prove previste.

Rivolgersi ai docenti per ulteriori spiegazioni e chiarimenti.

Ultimo aggiornamento 09/09/2018 18:09