



# UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PALERMO

<b>DIPARTIMENTO</b>	Scienze e Tecnologie Biologiche, Chimiche e Farmaceutiche		
<b>ANNO ACCADEMICO OFFERTA</b>	2019/2020		
<b>ANNO ACCADEMICO EROGAZIONE</b>	2021/2022		
<b>CORSO DILAUREA</b>	CHIMICA		
<b>INSEGNAMENTO</b>	CHIMICA FISICA III CON LABORATORIO		
<b>CODICE INSEGNAMENTO</b>	13737		
<b>MODULI</b>	Si		
<b>NUMERO DI MODULI</b>	2		
<b>SETTORI SCIENTIFICO-DISCIPLINARI</b>	CHIM/02		
<b>DOCENTE RESPONSABILE</b>	FLORIANO MICHELE	Professore Ordinario	Univ. di PALERMO
<b>ALTRI DOCENTI</b>	CHILLURA MARTINO	Professore Associato	Univ. di PALERMO
	DELIA FRANCESCA		
	FLORIANO MICHELE	Professore Ordinario	Univ. di PALERMO
<b>CFU</b>	11		
<b>PROPEDEUTICITA'</b>	00133 - CHIMICA GENERALE ED INORGANICA 15248 - ESERCITAZIONI DI PREPARAZIONI CHIMICHE CON LABORATORIO		
<b>MUTUAZIONI</b>			
<b>ANNO DI CORSO</b>	3		
<b>PERIODO DELLE LEZIONI</b>	2° semestre		
<b>MODALITA' DI FREQUENZA</b>	Obbligatoria		
<b>TIPO DI VALUTAZIONE</b>	Voto in trentesimi		
<b>ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI</b>	<b>CHILLURA MARTINO</b> <b>DELIA FRANCESCA</b> Lunedì 15:00 16:00 Studio Prof. Chillura. Ed. 17 - Viale delle Scienze <b>FLORIANO MICHELE</b> Mercoledì 11:00 13:00 studio docente, ed. 17 viale delle Scienze		

**DOCENTE:** Prof. MICHELE FLORIANO

<b>PREREQUISITI</b>	Concetti di base della fisica classica. Principi della termodinamica classica di sistemi ideali e reali all'equilibrio.
<b>RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI</b>	<p>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.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>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</p> <p>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</p>
<b>VALUTAZIONE DELL'APPRENDIMENTO</b>	<p>Esame orale e discussione delle relazioni di laboratorio. La valutazione viene espressa in trentesimi.</p> <p>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.</p> <p>La valutazione complessiva e' una media pesata per i cfu delle valutazioni riportate nei due moduli.</p>
<b>ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA</b>	Lezioni frontali (modulo 1), Lezioni frontali e Esperienze di Laboratorio (modulo 2)

**MODULO  
CHIMICA FISICA III**

*Prof. MICHELE FLORIANO*

**TESTI CONSIGLIATI**

Testi di riferimento:

Peter W. Atkins and Julio De Paula, Atkins' Physical Chemistry, Ed. X 2014 Oxford University Press, ISBN: 9780199697403  
Peter W. Atkins, Julio De Paula, Chimica Fisica, V edizione (realizzata sulla IX edizione originale), Zanichelli, 2012. ISBN 9788808261380

Testi di consultazione:

R.L. Rowley, Statistical Mechanics for Thermophysical Property Calculations, PTR Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, USA, 1994

D.A. McQuarrie, Statistical Mechanics, Harper & Row, 1976

<b>TIPO DI ATTIVITA'</b>	B
<b>AMBITO</b>	50135-Discipline chimiche inorganiche e chimico-fisiche
<b>NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE</b>	136
<b>NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITA' DIDATTICHE ASSISTITE</b>	64
<b>OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO</b>	
Costruire una base di Meccanica Quantistica, spettroscopia, interazioni intermolecolari e Termodinamica Statistica.	

**PROGRAMMA**

<b>ORE</b>	<b>Lezioni</b>
2	Introduzione al corso. Discussione di programma e contenuti. Libri di testo. Connessione fra proprietà macroscopiche e caratteristiche microscopiche della materia
6	Inadeguatezze delle leggi della Fisica classica. Radiazione da corpo nero. Effetto fotoelettrico. Spettri atomici. Capacità termiche a basse temperature. Diffrazione di elettroni.
8	I postulati della Meccanica Quantistica. La funzione d'onda; gli operatori quantomeccanici; il valore d'attesa di un osservabile fisico; l'equazione di Schrödinger.
8	Risoluzione dell'equazione di Schrödinger. La particella libera; il principio di indeterminazione di Heisenberg e il dualismo onda-corpuscolo; le fughe quantistiche.
8	La particella confinata; la quantizzazione dell'energia. Il rotore rigido; quantizzazione del momento angolare. L'oscillatore armonico. Gli atomi idrogenoidi; gli orbitali atomici. Gli insuccessi della Fisica Classica spiegati dalla Teoria Quantistica. Cenni sul problema polielettronico. L'Hamiltoniano di un atomo polielettronico e di un sistema molecolare. L'approssimazione di Born-Oppenheimer. Lo spin elettronico. La funzione d'onda come determinante di Slater e gli orbitali molecolari. Il metodo variazionale. Applicazione alla molecola d'idrogeno.
6	Lo spettro elettromagnetico. Interazione radiazione - materia. Aspetti generali della spettroscopia molecolare. Regole di selezione. Assorbimento ed emissione. Forma delle righe spettrali.
4	Assorbimento di microonde. Spettroscopia rotazionale in fase gassosa.
4	Assorbimento nell'infrarosso. Spettroscopia vibrazionale in fase gassosa e in soluzione. Modi normali di vibrazione. Uso di spettri vibrazionali per il riconoscimento di sostanze.
4	Assorbimento nel visibile e UV. Spettroscopia elettronica. Decadimento dello stato eccitato. Fluorescenza e fosforescenza.
4	Stato gassoso. Il gas ideale. Deviazioni dal comportamento ideale. Fattore di compressibilità. Equazione di van der Waals. Interazioni intermolecolari e forze di dispersione. Transizioni di fase. La regione critica e caratteristiche di universalità. Legge degli stati corrispondenti.
6	Sistemi di particelle interagenti. Potenziali di interazione empirici. Potenziali ab initio. Energia potenziale configurazionale. Lo stato liquido. Aspetti strutturali e dinamici.
4	Introduzione ai concetti fondamentali di termodinamica statistica.

**MODULO  
LABORATORIO DI CHIMICA FISICA III**

*Prof.ssa DELIA FRANCESCA CHILLURA MARTINO*

**TESTI CONSIGLIATI**

I testi adottati nei tre corsi teorici  
Materiale fornito dal docente

<b>TIPO DI ATTIVITA'</b>	C
<b>AMBITO</b>	10693-Attività formative affini o integrative
<b>NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE</b>	30
<b>NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITA' DIDATTICHE ASSISTITE</b>	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 ore di lezioni frontali sono distribuite (6 ore) per illustrare le esperienze e (2 ore) per discutere i risultati delle esperienze sulla base di un approccio di didattica circolare.

**PROGRAMMA**

<b>ORE</b>	<b>Laboratori</b>
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. 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.