Università degli Studi di Roma "Tor Vergata"

Facsimile Scheda Insegnamento

Mod. Scheda Insegnamento v. 1.1

Docente responsabile dell'insegnamento/attività formativa

Nome	Claudia
Cognome	Mazzuca

Denominazione insegnamento/attività formativa

Italiano	Chimica Fisica II e Laboratorio
Inglese	Physical Chemistry II and Laboratory

Informazioni insegnamento/attività formativa

A.A.	2022/23
	(●) L ( ) LM ( ) LM CU
CdS	Chimica Applicata Laurea Triennale
Codice	8067141
Canale	
CFU	12
Lingua	Italiano

Docente del modulo didattico (compilare solo per attività formative articolate in moduli)

Nome	
Cognome	

Denominazione modulo didattico (compilare solo per attività formative articolate in moduli)

Italiano	
Inglese	

Obiettivi formativi e risultati di apprendimento attesi

Italiano	OBIETTIVI FORMATIVI: Conoscenza dei fondamenti e dei metodi della Meccanica Quantistica. Conoscenza delle proprietà molecolari descritte secondo la Meccanica Quantistica. Conoscenza dei fondamenti della Termodinamica Statistica. Conoscenze di base della spettroscopia (atomica e molecolare) e sull'utilizzo di alcune tecniche spettroscopiche al fine di ottenere parametri molecolari quali lunghezze di legame, costanti di forza, proprietà di stati elettronici. CONOSCENZA E CAPACITÀ DI COMPRENSIONE: Profondità e coerenza della conoscenza delle metodologie chimico-fisiche per la descrizione delle molecole e delle loro proprietà. Capacità di applicazione dei metodi chimico-fisici a casi specifici. CAPACITÀ DI APPLICARE CONOSCENZA E COMPRENSIONE: Capacità di calcolo di osservabili fisiche in sistemi modello. Capacità di interpretazione di osservabili sperimentali in termini di proprietà molecolari e statistiche. Capacità di effettuare esperimenti di tipo spettroscopico ed interpretarne i dati.
Inglese	LEARNING OUTCOMES: Knowledge of the fundamentals of Quantum Mechanics. Description of the molecular properties according to Quantum Mechanics concepts. Knowledge of the fundamentals of Statistical Thermodynamics. Basic knowledge of atomic and molecular spectroscopy; use of some spectroscopic techniques to obtain molecular parameters such as bond lengths, and properties of electronic states. KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING:understanding of physico-chemical methodologies for the description of properties of molecules. Capability of applying quantum.mechanics approach to case-studies. APPLYING KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING:Ability to calculate physical observables in model systems. Ability to interpret experimental observables in terms of molecular and statistical properties. Ability to perform spectroscopic experiments and analyze data.

Università degli Studi di Roma "Tor Vergata"

Facsimile Scheda Insegnamento

Prerequisiti

Italiano	Acquisizione dei concetti di base dei corsi di Analisi I e II, di Fisica I e II e di Chimica Fisica I.
Inglese	Notions of Mathematic I and II, Physic I and II and Physical Chemistry I

Programma

Italiano	Proprietà dello spazio di Hilbert. Vettori di base. Principio di sovrapposizione degli stati. Processo di ortogonalizzazione. Operatori quanto-meccanici. Regole di corrispondenza. Equazione agli autovalori. Ortogonalità di autofunzioni corrispondenti ad autovalori diversi (dim.). Postulati della meccanica quantistica. Dipendenza temporale della funzione di stato. Generalizzazione del 3° postulato. Soluzioni stazionarie dell'equazione di Schrödinger. Operatore commutatore. Principio di indeterminazione. Variazione temporale del valore aspettato. Autofunzioni comuni a più operatori. Notazione di Dirac. Proprietà delle matrici che rappresentano un operatore quanto-meccanico. Principio di corrispondenza. Variabili indipendenti. Fattorizzazione della funzione di stato. Particella libera monodimensionale. Particella nella scatola monodimensionale a pareti rigide. Stima degli stati traslazionali di una particella in una scatola tridimensionale. Densità
Inglese	Properties of Hilbert space. Basic vectors. Superposition principle. Orthogonalization process. Quantum-mechanical operators. Correspondence principle. Eigenvalues and eigenfunctions Postulates of quantum mechanics. Time dependent state function. Generalization of the 3rd postulate. Stationary solutions of the Schrödinger equation. Switch operator. Uncertainty principle. Time variation of expected value. Simultaneous eigenfunctions. Dirac notation. Properties of matrices representing a quantum mechanical operator. Correspondence principles. Independent variables. Factorization of the status function. One-dimensional free particle. Particle in the one-dimensional box with rigid walls. Translational states of a particle in a three-dimensional box. Density and degeneration of translational states. Barrier with V> E: tunnel effect. Harmonic Oscillator. Eigenfunctions

Modalità di valutazione

- [x] Prova scritta
- [x] Prova orale
- [x] Valutazione in itinere
- [ ] Valutazione di progetto
- [ ] Valutazione di tirocinio
- [ ] Prova pratica
- [ ] Prova di laboratorio

Descrizione delle modalità e dei criteri di verifica dell'apprendimento

Italiano	Durante lo svolgimento del corso, saranno effettuate 2 prove scritte di accertamento parziale, ciascuna costituita da 3 esercizi a carattere applicativo, da svolgersi in un tempo massimo di 2 ore. In caso di esito complessivamente sufficiente lo studente può effettuare l'esame orale conclusivo teso ad accertare la conoscenza metodologica di tipo generale. A discrezione dello studente, le due prove scritte possono essere sostituite da 1 scritto a carattere generale che, in caso di esito sufficiente, permette di sostenere l'esame orale finale. Condizioni necessarie per affrontare la prova orale sono 1) la frequenza obbligatoria alle esperienze di laboratorio; 2) la presentazione di relazioni scritte sulle esperienze di laboratorio con relativa interpretazione dei dati spettrali. Possibile modalità di graduazione del voto per esame scritto
Inglese	The evaluation is made through 2 intermediate evaluations (each consisting of 3 exercises, to be performed in a maximum time of 2 hours) and a final exam (written and oral). A positive evaluation at the intermediate test give direct access to the oral exam, otherwise a positive evaluation in the written proof is needed. The students have to prepare a report on the laboratory experiences that will be considered in the final score. Evaluation of written exam The written task is divided into two or three exercises on topics covered during the course and explained with exercises, at different degrees of difficulty. The evaluation of the written part will be averaged with that of the oral exam.

Testi adottati

Italiano	P. W. Atkins, R. Friedman, Molecular Quantum Mechanics, Oxford University Press - B. Pispisa, Appunti di termodinamica Statistica, dispense. - D.D. Fitts, Principles of Quantum Mechanics, Cambridge University Press - F. Bernath, Spectra of Atoms and Molecules, Oxford University Press - C. N. Banwell, E. M. McCash,Fundamental of Molecular Spectroscopy. Mc Graw-Hill - Appunti, materiale didattico ed esercizi forniti dai docenti.
Inglese	P. W. Atkins, R. Friedman, Molecular Quantum Mechanics, Oxford University Press, 2007. - B. Pispisa, Appunti di termodinamica Statistica, dispense. - D.D. Fitts, Principles of Quantum Mechanics, Cambridge University Press - F. Bernath, Spectra of Atoms and Molecules, Oxford University Press - C. N. Banwell, E. M. McCash,Fundamental of Molecular Spectroscopy. Mc Graw-Hill - Notes, teaching material and exercises provided by professors.

Bibliografia di riferimento

Italiano	
Inglese	

Modalità di svolgimento

☒ Modalità in presenza
☒ Modalità a distanza

Descrizione della modalità di svolgimento e metodi didattici adottati

Italiano	lezioni frontali, esercitazioni numeriche.
Inglese	lectures, exercises.

Modalità di frequenza

◉ Frequenza facoltativa
○ Frequenza obbligatoria

Descrizione della modalità di frequenza

Italiano	Frequenza obbligatoria alle esperienze di laboratorio; frequenza caldamente consigliata alle lezioni frontali.
Inglese	Students must attend laboratories.