Università degli Studi di Roma "Tor Vergata"

Facsimile Scheda Insegnamento

Mod. Scheda Insegnamento v. 1.1

Docente responsabile dell'insegnamento/attività formativa

Nome	Antonio
Cognome	Palleschi

Denominazione insegnamento/attività formativa

Italiano	Chimica Fisica II
Inglese	Physical Chemistry II

Informazioni insegnamento/attività formativa

A.A. 2024/25 — (•) L ( ) LM ( ) LM CU

CdS	Chimica
Codice	8067131
Canale	
CFU	9
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. 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. AUTONOMIA DI GIUDIZIO: Dimostrare di avere la capacità di formulare giudizi autonomi su problematiche scientifiche.
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. 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. MAKING JUDGEMENTS: Demonstrate the capability of performing independent judgments on scientific problems and on experimental 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 del corso di Chimica Fisica I.
Inglese	Basic notions of Mathematic I and II, Physic I and II and Physical Chemistry I are required.

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 e degenerazione degli stati traslazionali. Barriera con V> E: effetto tunnel. Oscillatore
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. Graduazione del voto: 18-21, lo studente ha acquisito i concetti di base della disciplina, modo di esprimersi e linguaggio sufficientemente corretti. 22-25, lo studente ha acquisito in maniera approfondita i concetti di base della disciplina. Il linguaggio è appropriato e corretto.
Inglese	The evaluation is made through 2 intermediate written tests (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 tests gives direct access to the oral exam, otherwise a positive evaluation in the written proof is needed. Graduation of exam grade: 18-21, the student has acquired the basic concepts of the discipline, way of expressing himself and language sufficiently correct. 22-25, the student has acquired the basic concepts of the discipline. The language is appropriate and correct. 26-29, the student has a well-structured and complete set of knowledge. He is able to independently apply and re-elaborate the acquired knowledge. Highlight logical-analytical skills with appropriate language.

Testi adottati

Italiano	- P. W. Atkins, R. Friedman, Molecular Quantum Mechanics, Oxford University Press, 2007. - B. Pispisa, Appunti di termodinamica Statistica, dispense fornite dal docente. - Appunti, materiale didattico ed esercizi forniti dal docente.
Inglese	- P. W. Atkins, R. Friedman, Molecular Quantum Mechanics, Oxford University Press, 2007. - B. Pispisa, Appunti di termodinamica Statistica, provided by the professor. - 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	Le lezioni e le esercitazioni saranno svolte negli orari stabiliti stimolando gli studenti con esempi ed applicazioni pratiche.
Inglese	Lessons and exercises will take place at set times, stimulating students with examples and practical applications.

Modalità di frequenza

◉ Frequenza facoltativa
○ Frequenza obbligatoria

Descrizione della modalità di frequenza

Italiano	La frequenza alle lezioni frontali ed alle esercitazioni numeriche è fortemente consigliata.
Inglese	Attendance at lectures and numerical exercises is strongly recommended.