

DENOMINAZIONE INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

CHIMICA FISICA DELLO STATO FLUIDO: MODELLI MECCANICO STATISTICI E SPETTROSCOPIA

PHYSICAL CHEMISTRY OF THE FLUID STATE: STATISTICAL MECHANICAL MODELS AND SPECTROSCOPY

INFORMAZIONI INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

A.A.	2026-2027	CdS	CHIMICA
Codice	8068973	Canale	Unico
CFU	9 (5 +4) cfu	Lingua	Italiano

DOCENTE RESPONSABILE DELL'INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

PAOLO CALLIGARI

CODOCENTE

ANDREA AMADEI

Modulo: Modelli Meccanico Statistici/

OBIETTIVI FORMATIVI E RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano	<p>OBIETTIVI FORMATIVI:</p> <p>Conoscenza delle tecniche spettroscopiche trattate nel programma [spettroscopia di emissione, spettroscopie con luce polarizzata (dicroismo lineare e circolare, anisotropia di fluorescenza), spettroscopie risolte nel tempo (fluorescenza, assorbimento transiente), spettroscopia di singola molecola, microscopia quantitativa], dei loro principi teorici e dei loro aspetti strumentali ed applicativi</p> <p>CONOSCENZA E CAPACITÀ DI COMPrensIONE:</p> <p>Capacità di valutare criticamente i dati ed elaborare idee originali in un contesto di ricerca</p> <p>CAPACITÀ DI APPLICARE CONOSCENZA E COMPrensIONE:</p> <p>Capacità di impostare ed ottimizzare un esperimento, di rivelare possibili artefatti e le relative soluzioni. Applicare le tecniche spettroscopiche a tematiche nuove o non familiari, e per risolvere problemi</p> <p>AUTONOMIA DI GIUDIZIO:</p> <p>Nella parte di laboratorio viene assegnato a gruppi di studenti un problema scientifico e sono loro stessi a dover decidere quali delle tecniche illustrate nel corso applicare e come. Pertanto, è richiesto il raggiungimento di un'elevata autonomia di giudizio ed una buona comprensione degli argomenti trattati, già durante lo svolgimento del corso</p>
-----------------	---

	<p>ABILITÀ COMUNICATIVE:</p> <p>La relazione delle attività di laboratorio deve essere redatta in forma di articolo scientifico. Pertanto, alla fine del corso, gli studenti apprendono la principale forma di comunicazione scientifica.</p> <p>CAPACITÀ DI APPRENDIMENTO:</p> <p>Al termine del corso gli studenti dovrebbero essere in grado di studiare in modo autonomo testi ed articoli scientifici di ambito spettroscopico, anche specialistico.</p>
<i>English</i>	<p>LEARNING OUTCOMES:</p> <p><i>The students are expected to attain a good knowledge of the spectroscopic techniques described in the course program, of their theory, instrumentation and applications</i></p> <p>KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING:</p> <p><i>Ability to evaluate critically spectroscopic datasets, and to conceive original ideas in a research context</i></p> <p>APPLYING KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING:</p> <p><i>Ability to set up and optimize an experiment, detect possible artifacts and find solutions to these issues. The students should also become able to apply spectroscopic techniques to novel or unfamiliar problems, solving them.</i></p> <p>MAKING JUDGEMENTS:</p> <p><i>In the laboratory, groups of students are assigned to a scientific problem (e.g. complex formation) and must decide autonomously which techniques to use, and how. Therefore, during the course they are expected to reach a good decision-making ability, and a good understanding of the lecture topics.</i></p> <p>COMMUNICATION SKILLS:</p> <p><i>The report of the lab activity must be conceived as a scientific article. Therefore, by the end of the course, students have learnt the main modality of scientific communication.</i></p> <p>LEARNING SKILLS:</p> <p><i>By the end of the course, students should be able to study autonomously books and scientific articles related to the spectroscopic techniques discussed in the lectures.</i></p>

PREREQUISITI

Italiano	La preparazione ottenuta con la laurea triennale è sufficiente per seguire questo corso
<i>English</i>	<i>The preparation obtained with the first level degree is sufficient to follow this course</i>

PROGRAMMA E CRONOPROGRAMMA

Italiano	Richiami di meccanica quantistica (4 ore)
-----------------	---

	<p>Richiami di Spettroscopia in assorbimento (4 ore)</p> <p>Meccanica Statistica (22 ore): Operatore densità, Ensemble Canonico ed Isobarico, meccanica statistica dei sistemi misti classico-quantistici, il potenziale chimico, applicazioni alla termodinamica e Cinetica chimiche.</p> <p>Spettroscopia di emissione (4 ore)</p> <p>Dinamica molecolare e calcoli meccanico statistici per lo stato fluido (6 ore): spettroscopia computazionale e modelli di processi chimici.</p> <p>Spettroscopia risolta nel tempo (4 ore)</p> <p>Spettroscopia con luce polarizzata (6 ore)</p> <ul style="list-style-type: none"> o Dicroismo circolare o Anisotropia di fluorescenza <p>Spettroscopia con soppressione di fluorescenza (6 ore)</p> <p>Esperienze di laboratorio:</p> <p>Le esperienze di laboratorio comprendono l'uso di varie tecniche di spettroscopia molecolare, illustrate durante le lezioni frontali e applicate a temi rilevanti per i curricula del corso di laurea.</p> <p>Esercitazioni in aula:</p> <p>Una parte delle attività sarà dedicata a esercitazioni in aula, focalizzate sull'apprendimento delle tecniche di analisi dei dati utilizzate per le esperienze di laboratorio.</p>
<p><i>English</i></p>	<p><i>Review of Quantum Mechanics (4 hours)</i></p> <p><i>Review of Absorption Spectroscopy (4 hours)</i></p> <p><i>Statistical Mechanics (22 hours): Density operator, Canonical and Isobaric Ensembles, statistical mechanics of mixed classical-quantum systems, chemical potential, applications to thermodynamics and chemical kinetics.</i></p> <p><i>Emission Spectroscopy (4 hours)</i></p> <p><i>Molecular Dynamics and Statistical Mechanical Calculations for Fluid Systems (6 hours): computational spectroscopy and models of chemical processes.</i></p> <p><i>Time-Resolved Spectroscopy (4 hours)</i></p> <p><i>Polarized Light Spectroscopy (6 hours):</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <i>Circular Dichroism</i> <i>Fluorescence Anisotropy</i> <p><i>Fluorescence Quenching Spectroscopy (6 hours)</i></p> <p><i>Laboratory</i></p> <p><i>The laboratory sessions include the use of various molecular spectroscopy techniques, introduced during lectures and applied to topics relevant to the degree programme curricula.</i></p> <p><i>Classroom Exercises</i></p>

Part of the course activities will be devoted to classroom exercises focused on learning the data analysis techniques used in the laboratory sessions.

TESTI ADOTTATI E BIBLIOGRAFIA DI RIFERIMENTO

Italiano	<p>Dirac, P.A.M. (1958). The Principles of Quantum Mechanics. Clarendon Press.</p> <p>Amadei, A.; Aschi, M. (2025). Statistical Mechanics for Chemical Thermodynamics and Kinetics. Springer.</p> <p>Jameson, D. M. (2014). Introduction to fluorescence. CRC press.</p> <p>Bibliografia di riferimento: Gryczynski, Z.; Gryczynski, I. Practical Fluorescence Spectroscopy, CRC 2020.</p> <p>Lakowicz, J. R. Principles of fluorescence spectroscopy. Springer 2013</p> <p>Bernard Valeur, Mario Nuno Berberan-Santos Molecular Fluorescence: Principles and Applications, seconda edizione Wiley, 2012</p> <p>Cantor, C. R., & Schimmel, P. R. (1980). Biophysical chemistry: Part II: Techniques for the study of biological structure and function. Macmillan</p>
<i>English</i>	<p>Dirac, P.A.M. (1958). The Principles of Quantum Mechanics. Clarendon Press.</p> <p>Amadei, A.; Aschi, M. (2025). Statistical Mechanics for Chemical Thermodynamics and Kinetics. Springer.</p> <p>Jameson, D. M. (2014). Introduction to fluorescence. CRC press.</p> <p>Bibliografia di riferimento: Gryczynski, Z.; Gryczynski, I. Practical Fluorescence Spectroscopy, CRC 2020.</p> <p>Lakowicz, J. R. Principles of fluorescence spectroscopy. Springer 2013</p>

	<p>Bernard Valeur, Mario Nuno Berberan-Santos <i>Molecular Fluorescence: Principles and Applications</i>, seconda edizione Wiley, 2012</p> <p>Cantor, C. R., & Schimmel, P. R. (1980). <i>Biophysical chemistry: Part II: Techniques for the study of biological structure and function</i>. Macmillan</p>
--	--

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ DI SVOLGIMENTO E METODI DIDATTICI ADOTTATI

In presenza

A distanza

Italiano	Lezioni frontali, esercitazioni numeriche, dimostrazioni in classe, esperienze di laboratorio
<i>English</i>	<i>Lectures, numerical exercises, lecture demonstrations, laboratory experiments.</i>

MODALITÀ DI FREQUENZA

frequenza obbligatoria frequenza facoltativa

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ DI FREQUENZA

Italiano	La frequenza ai laboratori è obbligatoria. La frequenza delle lezioni è facoltativa, ma fortemente consigliata, considerando la difficoltà degli argomenti trattati
<i>English</i>	<i>Constant attendance at lectures is strongly suggested, given the complexity of the topics covered in the lectures. Attendance of lab experiments is required</i>

MODALITÀ DI VALUTAZIONE

Prova scritta

Prova orale

Prova di laboratorio

Prova pratica

Valutazione in itinere

Valutazione di progetto

Valutazione di tirocinio

COMPOSIZIONE DELLA COMMISSIONE VALUTATRICE

Paolo Calligari, Andrea Amadei, ...

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ E DEI CRITERI DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano	Prima di sostenere l'esame (ed in ogni caso entro luglio), gli studenti redigono in gruppo una relazione dell'attività di laboratorio, sotto forma di articolo scientifico. Queste relazioni vengono utilizzate per una prima valutazione, ma servono principalmente agli studenti per
-----------------	--

	<p>autovalutare il proprio grado di comprensione degli argomenti trattati. A tal fine, le relazioni vengono corrette e discusse insieme agli studenti.</p> <p>La valutazione avviene principalmente durante un esame finale, della durata di circa un'ora, in cui si discutono molti degli argomenti trattati, ponendo in genere tre domande, di cui una relativa all'esperienza di laboratorio e le altre sugli argomenti del corso. Viene data particolare attenzione alla capacità degli studenti di ragionare in base a quanto appreso e di applicare le tecniche studiate a problemi reali. A tal fine, spesso vengono proposti dei problemi o degli esperimenti non trattati nel corso. Inoltre, si chiede allo studente di illustrare e correggere gli errori eventualmente commessi nel redigere le relazioni.</p> <p>L'esame si ritiene superato con la sufficienza se lo studente dimostra di conoscere tutti gli argomenti affrontati durante l'orale e di averli compresi almeno per quanto riguarda i loro aspetti fondamentali.</p> <p>Graduazione del voto dell'esame orale:</p> <p>18-21, lo studente ha acquisito i concetti di base della disciplina e si esprime con un linguaggio sufficientemente corretto ed appropriato.</p> <p>22-25, lo studente ha acquisito in modo approfondito i concetti di base della disciplina ed è adeguatamente in grado di effettuare i collegamenti tra i vari argomenti del corso. Presenta linearità nella strutturazione del discorso. Il linguaggio è appropriato e corretto.</p> <p>26-29, lo studente possiede un bagaglio di conoscenze completo e ben strutturato. È in grado di applicare e rielaborare autonomamente le conoscenze acquisite. Mette in evidenza una ricchezza di riferimenti e capacità logico-analitiche con un linguaggio fluido, appropriato e vario.</p> <p>30 e 30 e lode, lo studente possiede una base di conoscenze completa e approfondita. È in grado di applicare la conoscenza a casi e problemi complessi ed estenderla a nuove situazioni. I riferimenti culturali sono ricchi e aggiornati. Si esprime con brillantezza e perfetta proprietà di linguaggio.</p>
<p><i>English</i></p>	<p><i>Before the exam, and in any case before the end of July, the students (in small groups) prepare a report on the laboratory experiments, in the form of a scientific article. These reports are used for a first evaluation of the students, but they are useful mainly for their self-assessment. To this end, they are corrected and discussed together with the students.</i></p> <p><i>Students' evaluation takes place mainly during the final oral exam, which lasts about one hour, where several of the topics taught during the course are discussed, usually asking three questions (one of which is on the laboratory experiments and the others refer to the course topics). A particular attention is given to the students' ability to elaborate what they have learnt, and to apply the techniques discussed in the course to real life problems. To this end, problems and experiments not discussed during the course can be used as exam</i></p>



problems to be discussed. In addition, the students are asked to illustrate and correct possible errors present in the report.

The exam is sufficient if the student shows that he/she knows all the topics discussed during the exam, and that he/she understood them at least in their basic aspects.

Graduation of the grade of the oral exam:

18-21, the student has acquired the basic concepts of the discipline and expresses himself with a sufficiently correct and appropriate language.

22-25, the student has acquired in depth the basic concepts of the discipline and is adequately able to make the connections between the various aspects treated in the course. The language is appropriate and correct.

26-29, the student has a complete and well-structured set of knowledge. He/she is able to independently apply and re-elaborate the acquired knowledge. The language is appropriate and varied.

30 and 30 cum laude, the student has a complete and in-depth knowledge base. He/she is able to apply knowledge to complex cases and problems and to extend it to new situations. The cultural references are rich and up-to-date. The language is brilliant and perfectly appropriate.