

DENOMINAZIONE INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

CHIMICA FISICA II

PHYSICAL CHEMISTRY II

INFORMAZIONI INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

A.A.	2026-2027	CdS	CHIMICA
Codice	8067131	Canale	Unico
CFU	9	Lingua	Italiano

DOCENTE RESPONSABILE DELL'INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

CLAUDIA MAZZUCA

CODOCENTE

ANDREA AMADEI

Modulo: Termodinamica Statistica

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 (quanto-meccanica e termodinamica statistica) 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 problemi scientifici. ABILITÀ COMUNICATIVE: Capacità di esporre, sia oralmente che tramite relazioni scritte, in maniera semplice e concisa, in un linguaggio scientifico corretto, le nozioni apprese. CAPACITÀ DI APPRENDIMENTO: Capacità di affrontare in maniera autonoma, ulteriori approfondimenti rispetto alle nozioni di base fornite dal corso.
<i>English</i>	LEARNING OUTCOMES:

	<i>Knowledge of the fundamentals of Quantum Mechanics. Description of the molecular properties according to Quantum Mechanics concepts. Knowledge of the fundamentals of Statistical Thermodynamics.</i> KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING: <i>Understanding of physico-chemical methodologies for the description of properties of molecules. Capability of applying quantum-mechanics and statistical thermodynamic approach to case-studies.</i> APPLYING KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING: <i>Ability to calculate physical observables in model systems. Ability to interpret experimental observables in terms of molecular and statistical properties.</i> MAKING JUDGEMENTS: <i>Demonstrate the capability of performing independent judgments on scientific problems.</i> COMMUNICATION SKILLS: <i>Capability to explain, orally and by reports, in a simple and concise way, in a scientific language, the learned notions and the results of laboratory experiences.</i> LEARNING SKILLS: <i>Students will be able to deepen, in an independent way, the knowledge presented in this course</i>
--	--

PREREQUISITI

Italiano	Acquisizione dei concetti di base dei corsi di Analisi I e II, di Fisica I e II e di Chimica Fisica I.
<i>English</i>	<i>Notions of Mathematic I and II, Physic I and II and Physical Chemistry I</i>

PROGRAMMA E CRONOPROGRAMMA

Italiano	Proprietà dello spazio di Hilbert. Vettori di base. Principio di sovrapposizione degli stati. Processo di ortogonalizzazione. Operatori quanto-meccanici. Equazione agli autovalori. Postulati della meccanica quantistica. Dipendenza temporale della funzione di stato. Generalizzazione del 3° postulato. Soluzioni stazionarie dell'equazione di Schrödinger. La notazione di Dirac. Operatore commutatore. Principio di indeterminazione. Variazione temporale del valore aspettato. Autofunzioni comuni a più operatori. Variabili indipendenti. Fattorizzazione della funzione di stato. (16 ore) La particella libera e la particella confinata; stima degli stati traslazionali di una particella in una scatola tridimensionale. Densità e degenerazione degli stati traslazionali. Degenerazione di scambio. Degenerazione di simmetria. Indistinguibilità di particelle identiche. Significato fisico delle funzioni simmetrica ed antisimmetrica. Barriera con $V > E$: effetto tunnel (10 ore). Oscillatore Armonico. Autofunzioni e autovalori dell'energia (6 ore). Operatori del momento angolare orbitale. Regole di commutazione. Quantizzazione spaziale. Autovalori ed autofunzioni. Rotatore rigido. Degenerazione del livello rotazionale.
-----------------	---

	Operatori di spin. Classificazione delle particelle in base allo spin Fermioni e bosoni. Principio di Pauli. (14 ore). L'atomo di idrogeno ed atomi idrogenoidi; accoppiamento spin-orbita. Il metodo variazionale (9 ore). Atomi polielettronici e metodo di Hartree-Fock (6 ore). I sistemi molecolari. Cenni sul metodo degli orbitali molecolari (11 ore). Termodinamica statistica: lo spazio degli stati; l'operatore densità; il teorema di Liouville-von Neumann; (8 ore). Distribuzioni di equilibrio nell'ensemble canonico e nell'ensemble microcanonico; la funzione di partizione e le sue proprietà; (8 ore).
English	<i>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. Factorization of the status function (16 hrs).</i> <i>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. (10 hrs) Harmonic Oscillator. Eigenfunctions and eigenvalues of energy (6 hrs).</i> <i>Exchange degeneration. Symmetry degeneration. Indistinguishability of identical particles. Physical meaning of the symmetric and antisymmetric functions.</i> <i>Operators of the orbital angular momentum. Commutators. Spatial quantization. Eigenvalues and eigenfunctions (without dim.). Rigid rotator. Eigenvalues and eigenfunctions. Degeneration of the rotational level. Spin operators. Particle classification based on spin. Exchange operator. Pauli's principle (14 hrs). The hydrogen atom and hydrogen-like atoms; spin-orbit coupling. The variational method (9 hours). Polyelectronic atoms and the Hartree-Fock method (6 hours). Molecular systems. The molecular orbital method (11 hours).</i> <i>Statistical thermodynamics: state space; the density operator; the Liouville-von Neumann theorem; (8 hours). Equilibrium distributions in the canonical ensemble and the microcanonical ensemble; the partition function and its properties; (8 hours).</i>

TESTI ADOTTATI E BIBLIOGRAFIA DI RIFERIMENTO

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 -A. Amadei, M. Aschi, Statistical Mechanics for Chemical Thermodynamics and Kinetics-Springer - Appunti, materiale didattico ed esercizi forniti dai docenti.
English	- 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 -A. Amadei, M. Aschi, Statistical Mechanics for Chemical Thermodynamics and Kinetics-Springer - <i>Notes, teaching material and exercises provided by professors</i>
--	---

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ DI SVOLGIMENTO E METODI DIDATTICI ADOTTATI

☒ In presenza ☐ A distanza

Italiano	lezioni frontali, esercitazioni numeriche, esercizi di autovalutazione
<i>English</i>	<i>frontal lessons, numerical exercises, self-assessment exercises</i>

MODALITÀ DI FREQUENZA

☐ frequenza obbligatoria ☒ frequenza facoltativa

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ DI FREQUENZA

Italiano	Lezioni frontali (in presenza) facoltative.
<i>English</i>	<i>Front-lessons (in presence) not compulsory.</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

Claudia Mazzuca, Andrea Amadei, Paolo Calligari, Mariano Venanzi, Gianfranco Bocchinfuso, Fabio Domenici, Ester Chiessi.

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ E DEI CRITERI DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano	Durante lo svolgimento del corso, sarà effettuata 1 prova scritta di accertamento parziale, 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, questa prova può essere sostituita da 1 scritto a carattere generale che, in caso di esito sufficiente, permette di sostenere l'esame orale finale.
-----------------	---

	Possibile modalità di graduazione del voto per esame scritto Il compito scritto è articolato in due o tre esercizi o domande aperte su argomenti trattati durante il corso e oggetto di lezioni frontali od esercitazioni numeriche, a diversi gradi di difficoltà. A questo elaborato viene data una valutazione in trentesimi e la votazione farà media con il risultato dell'esame orale. 18-23, lo studente ha acquisito i concetti di base della disciplina, sa risolvere esercizi semplici riguardanti i concetti generali della meccanica quantistica e termodinamica statistica. 24-27, lo studente ha acquisito in maniera approfondita i concetti di base della disciplina, ed effettuare i collegamenti fra le varie materie, risolvendo esercizi semplici e parte di esercizi e quesiti più complessi. Il linguaggio è appropriato e corretto. 28-29, lo studente possiede un bagaglio di conoscenze completo e ben strutturato. È in grado di risolvere esercizi semplici e gran parte di esercizi e quesiti più complessi. Si esprime con brillantezza e proprietà di linguaggio. 30 e 30 e lode, lo studente possiede un bagaglio di conoscenze completo e approfondito. È in grado di risolvere sia esercizi semplici che esercizi e quesiti più complessi, spiegando ed interpretando in maniera corretta i risultati. Possibile modalità di graduazione del voto per esame orale. 18-22, lo studente ha acquisito i concetti di base della disciplina, modo di esprimersi e linguaggio sufficientemente corretti e appropriati. 22-26, lo studente ha acquisito in maniera approfondita i concetti di base della disciplina, ed è abbastanza in grado di effettuare i collegamenti fra le varie parti del corso. Presenta linearità nella strutturazione del discorso. Il linguaggio è appropriato e corretto. 27-29, lo studente possiede un bagaglio di conoscenze completo e ben strutturato. È in grado di applicare e rielaborare in maniera autonoma, le conoscenze acquisite. Evidenzia ricchezza di riferimenti e capacità logico-analitiche con un linguaggio fluido, appropriato e vario. 30 e 30 e lode, lo studente possiede un bagaglio di conoscenze completo e approfondito. Sa applicare conoscenze a casi e problemi complessi ed estenderle a situazioni nuove. Si esprime con brillantezza e proprietà di linguaggio senza esitazioni.
English	<i>The evaluation is made through 1 intermediate evaluation (consisting of 3 exercises or open questions, 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.</i> <i>Evaluation of written exam</i>

The written task is divided into two or three exercises or open questions on topics covered during the course, at different degrees of difficulty. The evaluation of the written part will be averaged with that of the oral exam.

18-23, the student has acquired the basic concepts of quantum mechanics and statistical thermodynamics, knows how to solve simple exercises concerning the general concepts of quantum mechanics and statistical thermodynamics.

24-27, the student has deeply acquired the basic concepts of quantum mechanics and statistical thermodynamics, and is able to perform connections between the various subjects, solving simple exercises and part of more complex exercises and questions. The language is appropriate and correct.

28-29, the student has a complete and well-structured set of knowledge. He is able to solve simple exercises and a large part of more complex exercises and questions. It has a very good ability of explanation.

30 and 30 cum laude, the student has a complete and strong knowledge of the arguments. He/she is able to solve correctly both simple exercises and more complex exercises and questions, explaining and interpreting the results correctly.

Evaluation of the oral part of exam and of reports.

18-22, the student has acquired the basic concepts of quantum mechanics and statistical thermodynamics, and the used scientific language is sufficiently correct and appropriate.

23-26, the student has acquired deeply the basic concepts of quantum mechanics and statistical thermodynamics, and is quite capable of making suitable connections between the various parts of the course. The language is appropriate and correct.

27-29, the student has a complete and well-structured set of knowledge. The student is able to i apply and re-elaborate the acquired knowledge, with suitable scientific skills and an appropriate and varied language.

30 and 30 cum laude, the student has a complete and in-depth knowledge able to apply knowledge to complex and new problems and extend it to new situations. The student is able to explain and interpret results correctly.