RELAZIONE SULLO SPETTACOLO "CHIMICA, SCIENZA DI FORMA, LUCE E BELLEZZA" DI MERCOLEDÌ 5/04/2023

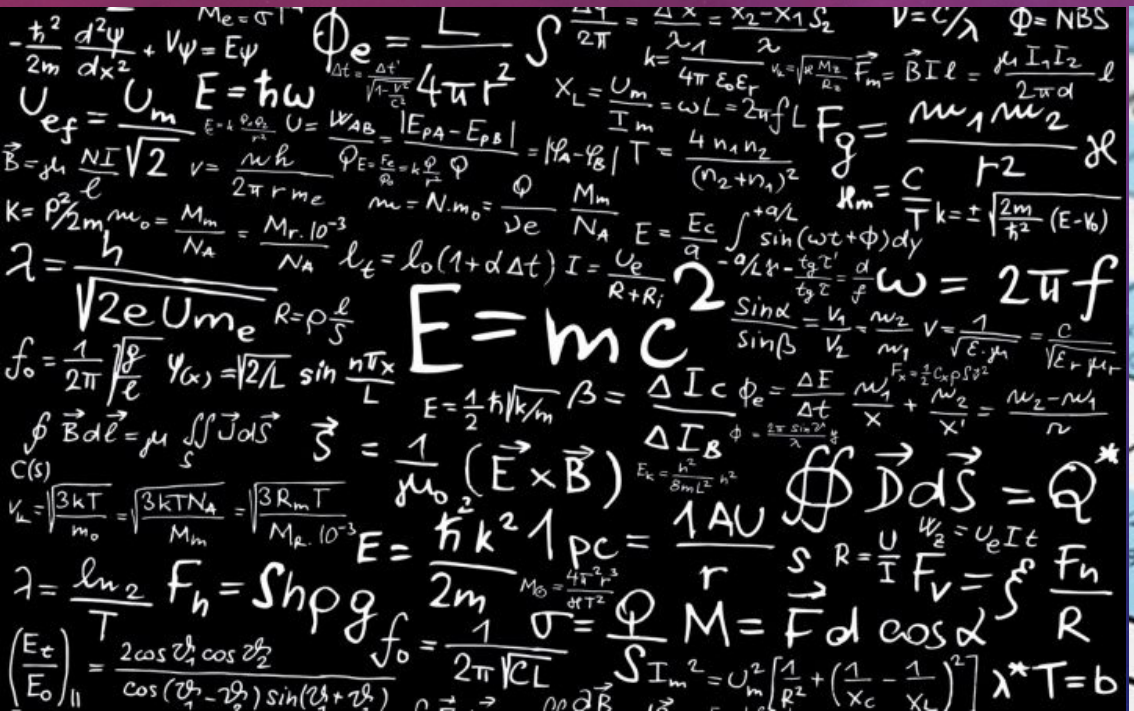
DI A. S.

Mercoledì 5 Aprile, presso l'Aula Magna del Liceo Scientifico E. Majorana, si è tenuta l'evento ***Chimica, scienza di forma luce e bellezza***, a cura del **professor Giovanni Morelli**, socio fondatore e Presidente dell'Associazione ***SiamoSapiens***.

Lo spettacolo al quale abbiamo assistito tratta **IL COLORE DELLE MOLECOLE** e della sua storia, segnata dalle scoperte scientifiche dei secoli precedenti e dalle ultime innovazioni, specialmente nel campo informatico.

CONFRONTO TRA CHIMICA E FISICA

- Fisica e chimica sono entrambi rami della scienza che studiano la natura e la materia. La differenza tra le due risiede nel loro ambito e nel loro approccio.
- La chimica è focalizzata sulle trasformazioni della materia, la fisica sulla sua struttura.





COME LE SCOPERTE DELLA FISICA HANNO INFLUENZATO LA CHIMICA?

- Il **principio di causa-effetto** è una correlazione tra due fenomeni per cui il secondo, l'effetto, è prodotto dal primo, la causa.
- **Seconda Legge di Newton**: l'accelerazione di un oggetto è direttamente proporzionale alla forza risultante agente su di esso e inversamente proporzionale alla sua massa.



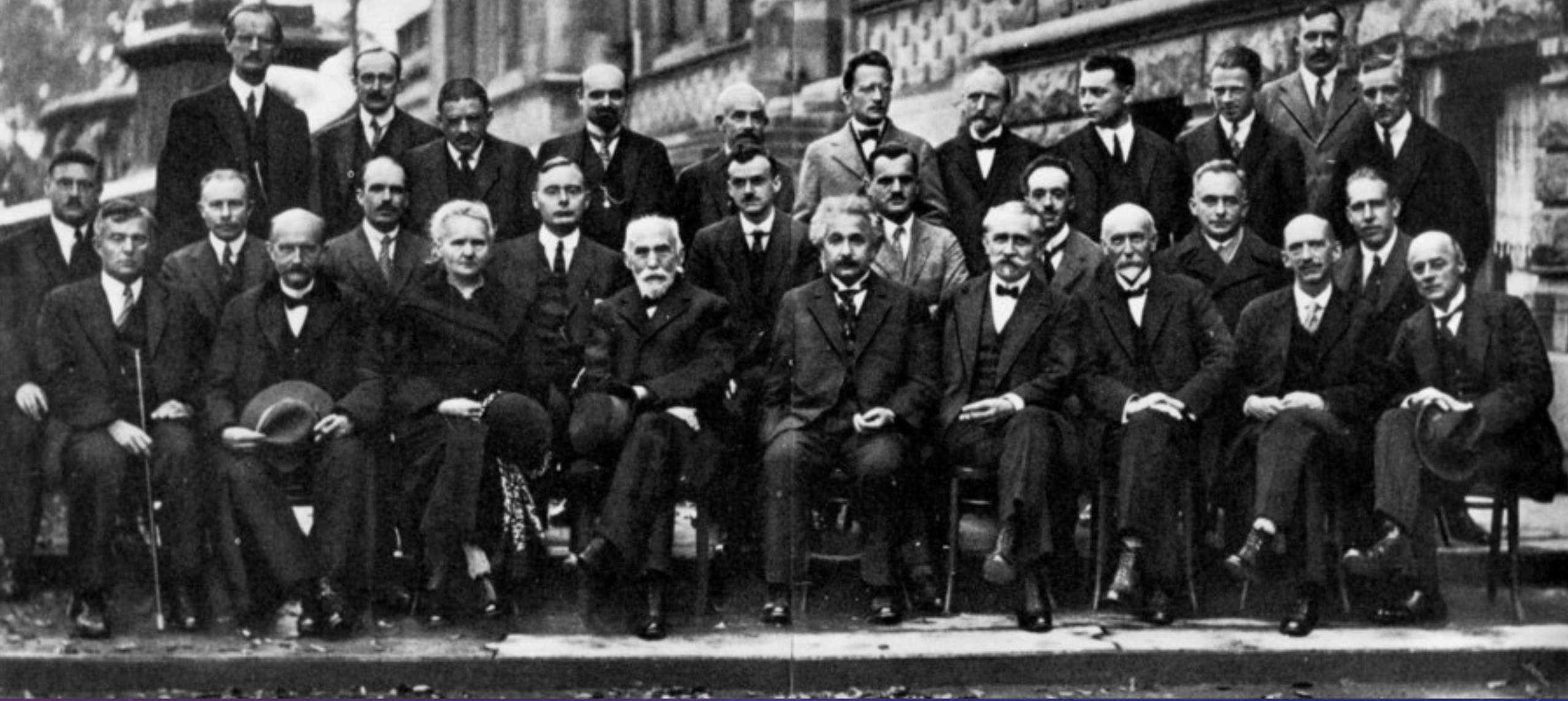
$$\sum_{i}^{N} \vec{F}_i = m\vec{a}$$

Somma delle forze

massa del corpo

accelerazione

$$a = \frac{F}{m}$$

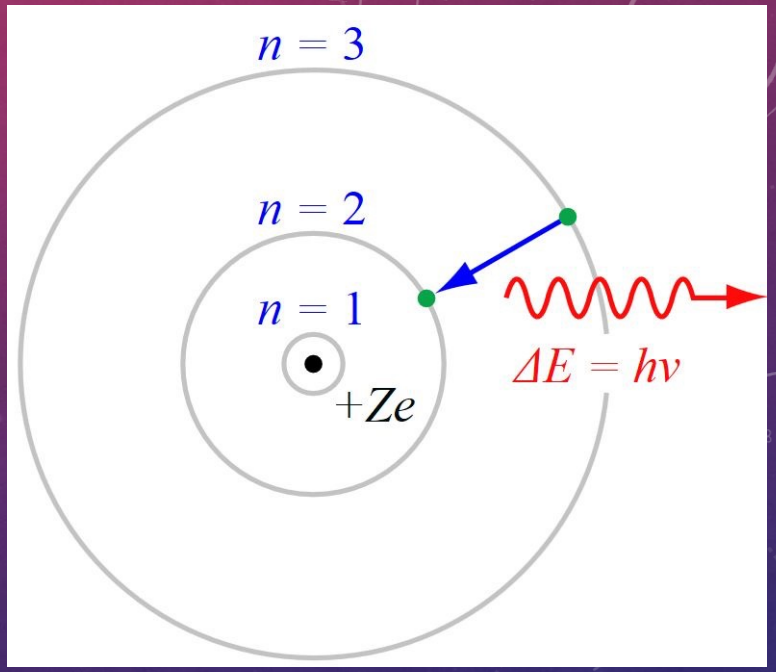


In piedi, in terza fila: A. Piccard, E. Henriot, P. Ehrenfest, E. Herzen, Th. de Donder, E. Schrödinger, J.E. Verschaffelt, W. Pauli, W. Heisenberg, R. Fowler, L. Brillouin; **Nella fila centrale**: P. Debye, M. Knudsen, W.L. Bragg, H.A. Kramers, P.A.M. Dirac, A.H. Compton, L. de Broglie, M. Born, N. Bohr; **Seduti davanti**: I. Langmuir, M. Planck, M. Skłodowska-Curie, H.A. Lorentz, A. Einstein, P. Langevin, Ch.-E. Guye, C.T.R. Wilson, O.W. Richardson

CRISI DELLA FISICA CLASSICA E RICERCA DI UNA NUOVA TEORIA

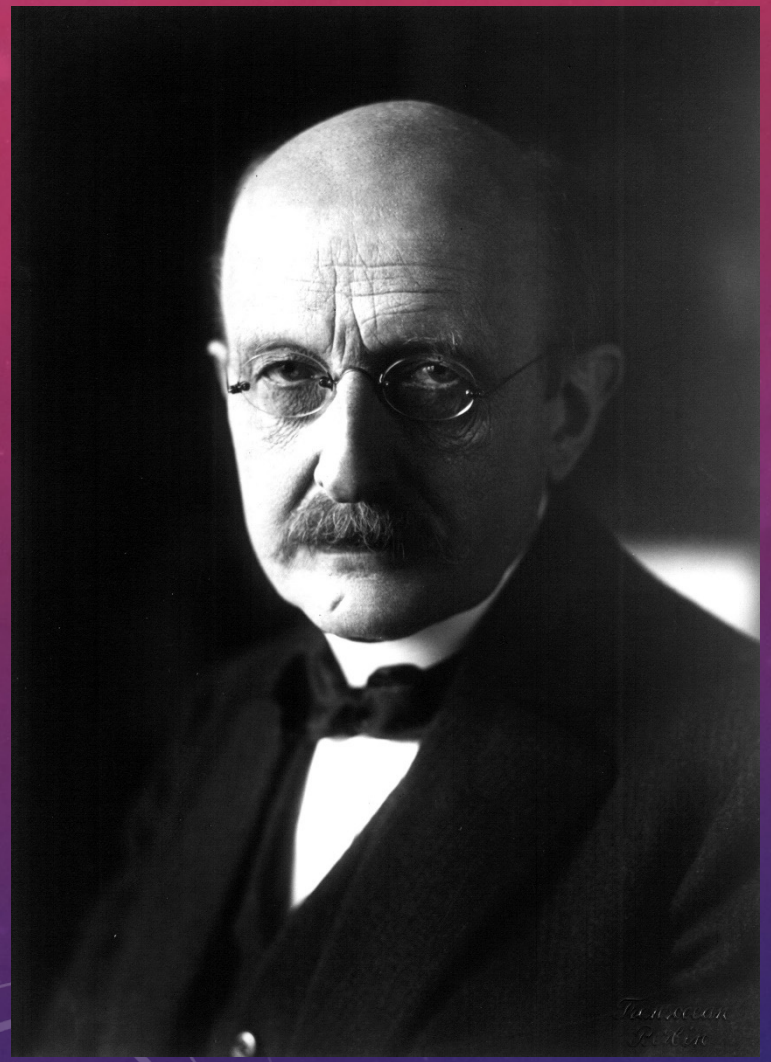


- Nel 1887 Heinrich Hertz scoprì che le scariche elettriche fra due corpi conduttori carichi erano molto più intense se i corpi venivano esposti a radiazione ultravioletta. Il fenomeno fu chiamato effetto fotoelettrico, e si scoprì che inspiegabilmente scompariva del tutto per frequenze della radiazione incidente più basse di un valore di soglia, indipendentemente dall'intensità totale di questa. Inoltre, se si verificava l'effetto fotoelettrico, l'energia degli elettroni emessi dalle piastre conduttrici risultava direttamente proporzionale alla frequenza della radiazione elettromagnetica. Tali evidenze sperimentali non si potevano spiegare con la classica teoria ondulatoria di Maxwell.
- Nel 1913 il fisico danese **Nielsen Bohr** propose un **modello empirico** per tentare di riunire le evidenze attorno alla stabilità dell'atomo di idrogeno e al suo spettro di emissione.



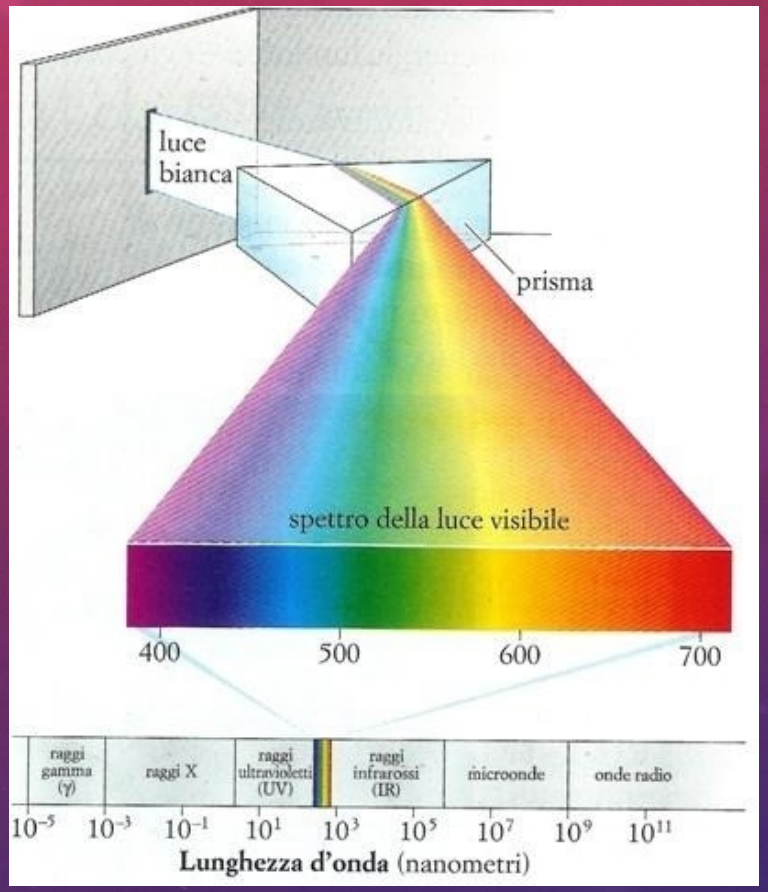
Modello di Bohr dell'atomo di idrogeno. Ogni qual volta l'elettrone scende ad una orbita inferiore emette radiazione elettromagnetica, sotto forma di un fotone, di energia corrispondente all'energia persa.

LA NASCITA DELLA FISICA QUANTISTICA



- **Max Planck**, nato **Marx Karl Ernst Ludwig Planck** (Kiel, 23 aprile 1858 – Gottinga, 4 ottobre 1947) è stato un fisico tedesco, iniziatore della fisica quantistica e premio Nobel per la fisica.
- Noto per la sua *Costante*, Max Planck ha studiato le radiazioni elettromagnetiche e formulato la teoria quantistica, di cui è considerato il padre.
- La ***meccanica quantistica*** (o ***fisica quantistica***) è la teoria fisica che descrive il comportamento della materia, della radiazione e le reciproche interazioni, con particolare riguardo ai fenomeni caratteristici della scala di lunghezza o di energia atomica e subatomica, dove le precedenti teorie classiche risultano inadeguate.

LA TEORIA DEI QUANTI

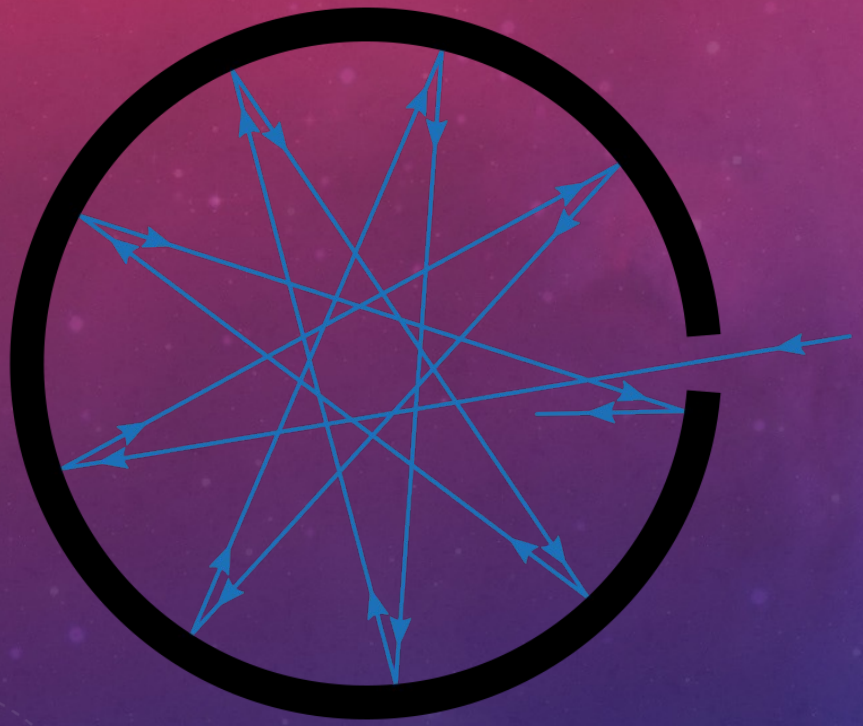


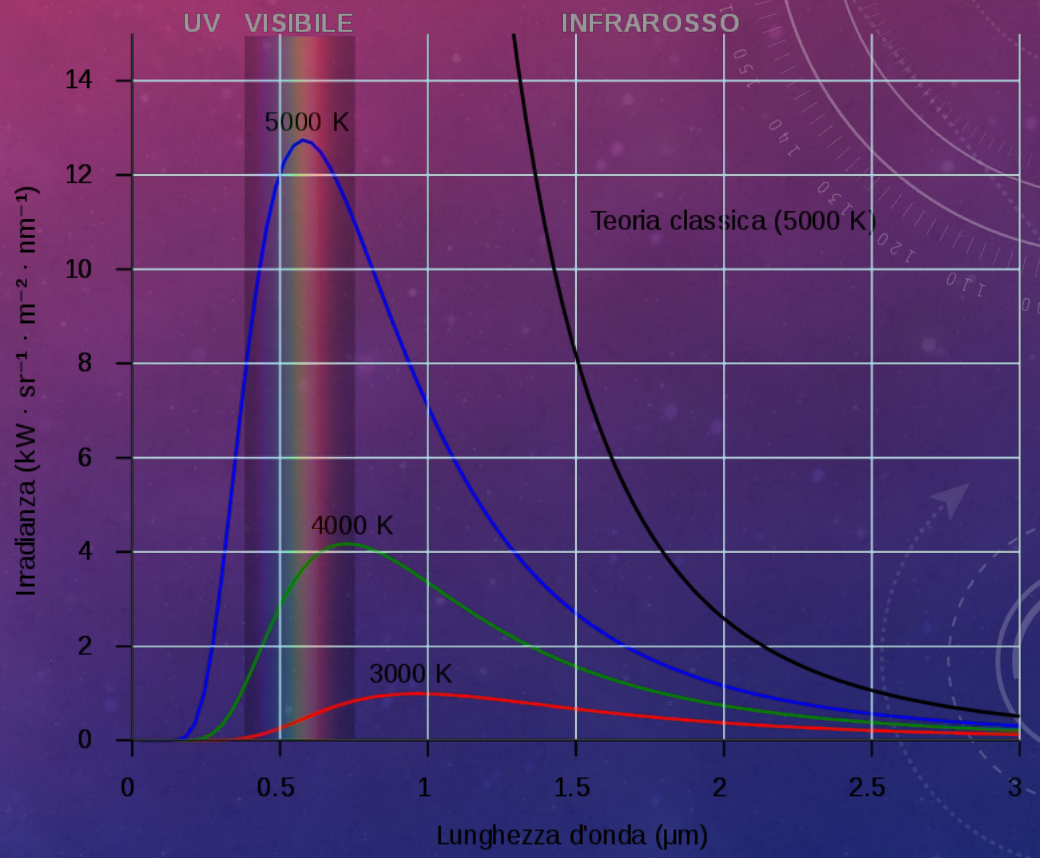
- Il problema dell'energia nella fisica classica era il seguente: ***se le onde all'interno di un corpo nero sono infinite, l'energia totale dovuta alle onde elettromagnetiche all'interno del corpo nero sarà infinita***. Questa soluzione, però, non è accettabile...
- Il grande contributo di Planck fu quello di capire di poter ottenere un'energia tendente a zero per altissime frequenze modificando il calcolo per arrivare all'energia media (tramite *l'energia scambiata dalle onde elettromagnetiche* = $\mathbf{k \cdot \Delta\varepsilon}$).
- L'idea di **Planck** si basava sul fatto che la radiazione emessa dal corpo nero fosse costituita da **una serie discontinua di porzioni elementari** a cui è associato un pacchetto di energia proporzionale alla frequenza della radiazione mediante la costante universale ***h***.



Un ***corpo nero*** è un oggetto in grado di assorbire completamente tutte le radiazioni che lo colpiscono, indipendentemente dalla lunghezza d'onda (nessuna radiazione passa attraverso di esso e nessuna radiazione è riflessa). Un esempio è costituito dal Sole.

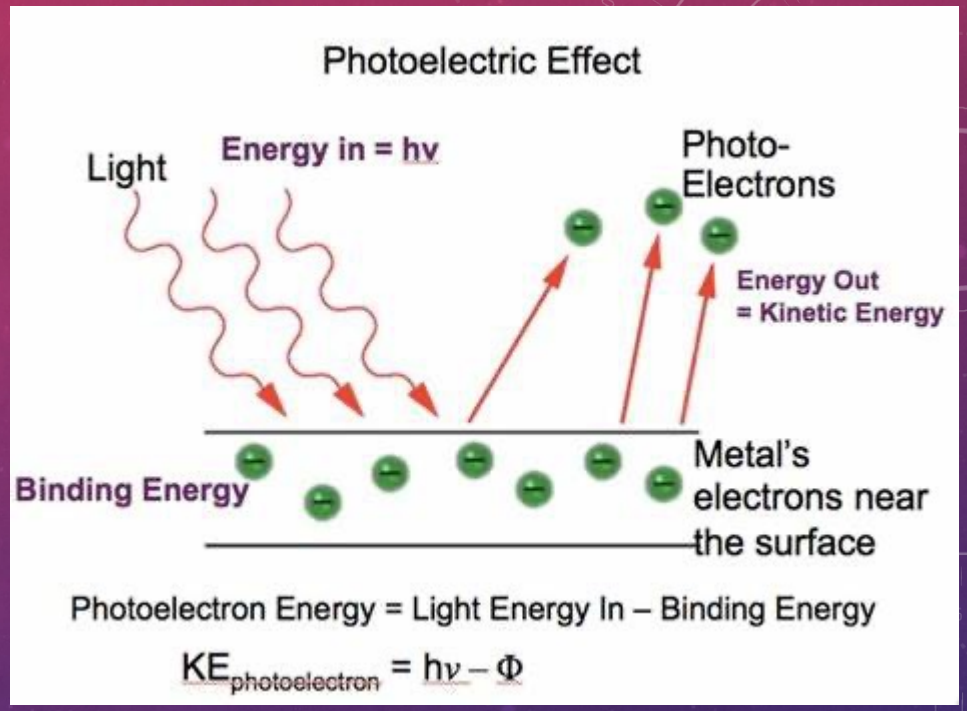
Emissione del corpo nero: un corpo nero emette uno spettro di radiazioni che dipende solo dalla temperatura e non dalla sua forma né dal materiale di cui è costituito.

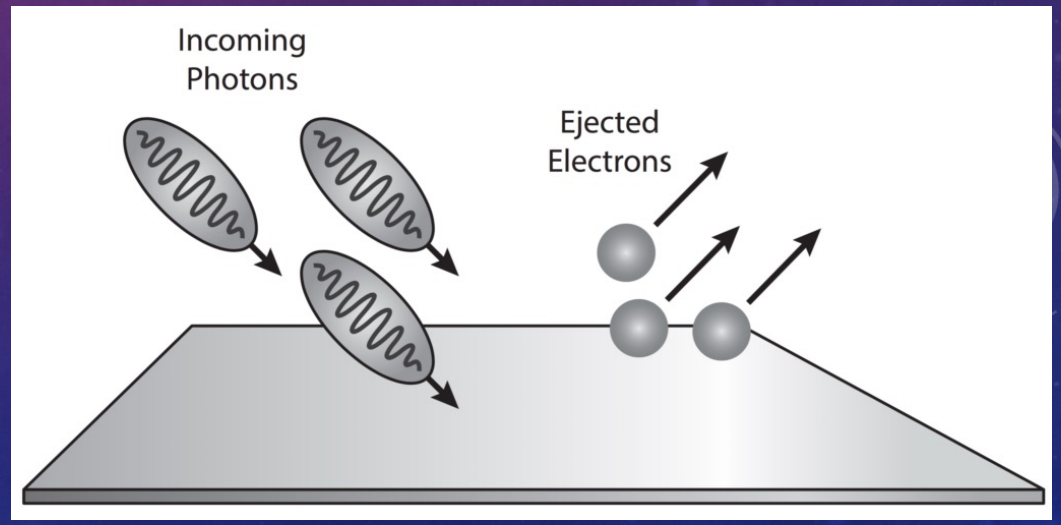




All'**aumentare** della temperatura, l'energia totale emessa **cresce**.

- Inizialmente la teoria dei quanti fu quasi accantonata ma poi fu ripresa e ampliata da Einstein.
- Nel 1905 **Albert Einstein** osservò che l'energia degli elettroni emessi non era legata all'intensità della radiazione incidente ma alla frequenza delle radiazioni che lo costituivano, secondo la relazione $E = h \cdot v$ e affermò che la luce è quantizzata, cioè costituita da un flusso di particelle di energia o quanti che nel 1923 chiamò ***fotoni***.
- La costante ***h***, detta oggi costante di Planck, vale $6{,}626 \times 10^{-34}\ J \cdot s$.
- La spiegazione di Einstein dell'effetto fotoelettrico valse a Planck il premio Nobel per la fisica nel 1918.







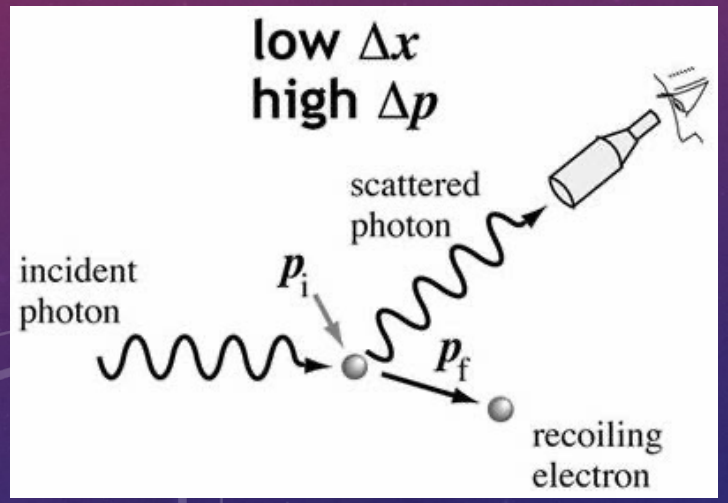
- **Werner Karl Heisenberg** nel 1927 elaborò una formalizzazione teorica del principio suddetto (***principio di indeterminazione di Heisenberg***), permettendo di quantificare l'indeterminazione insita nel nuovo concetto di misura:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$$

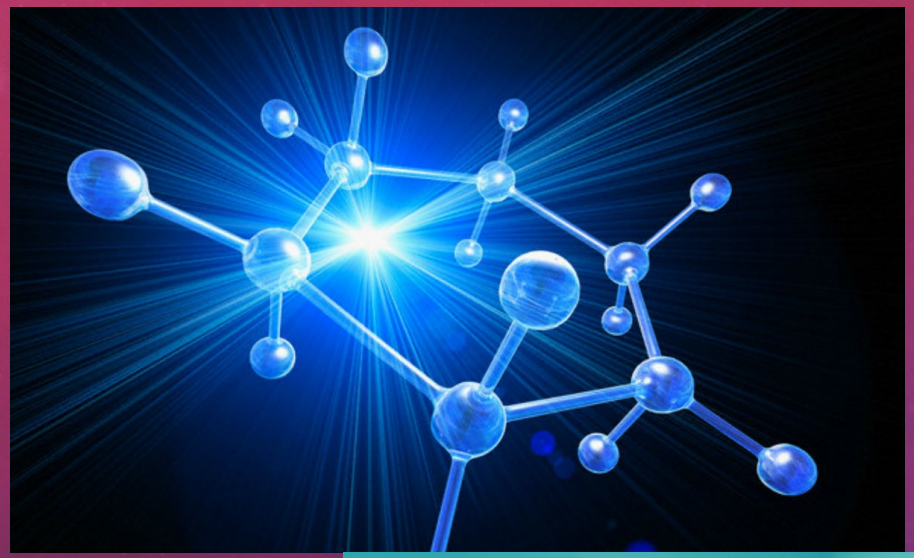
- È la prima formulazione completa della meccanica quantistica.
- **Erwin Schrödinger**, formulando la meccanica ondulatoria dei quanti, determinò la sua omonima equazione fondamentale, che determina l'evoluzione temporale dello stato di un sistema, ad esempio di una particella, di un atomo o di una molecola.
- Le formulazioni della meccanica quantistica che sono più frequentemente utilizzate sono quella lagrangiana e quella hamiltoniana.

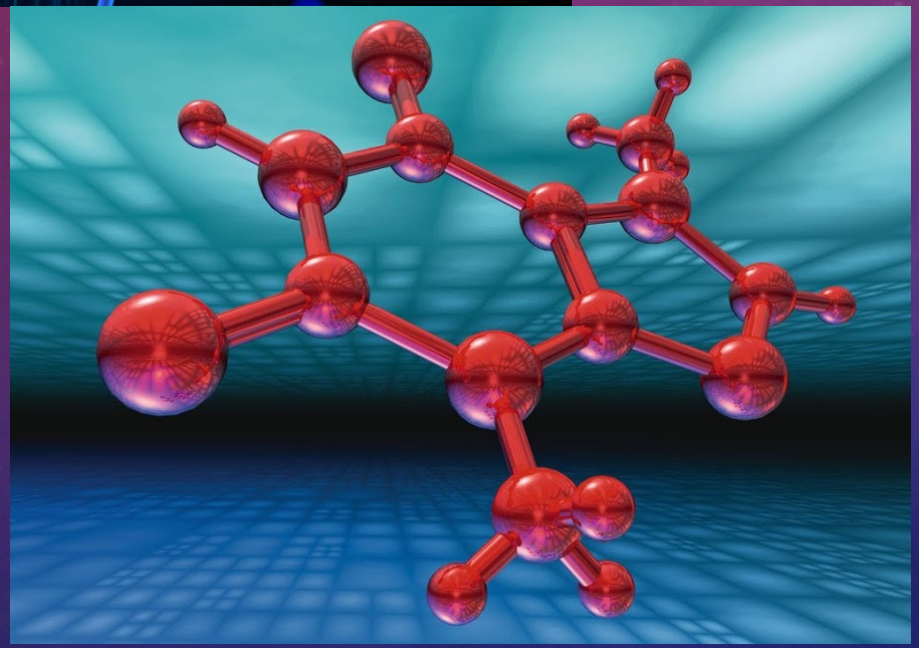


$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \hat{H}\Psi$$



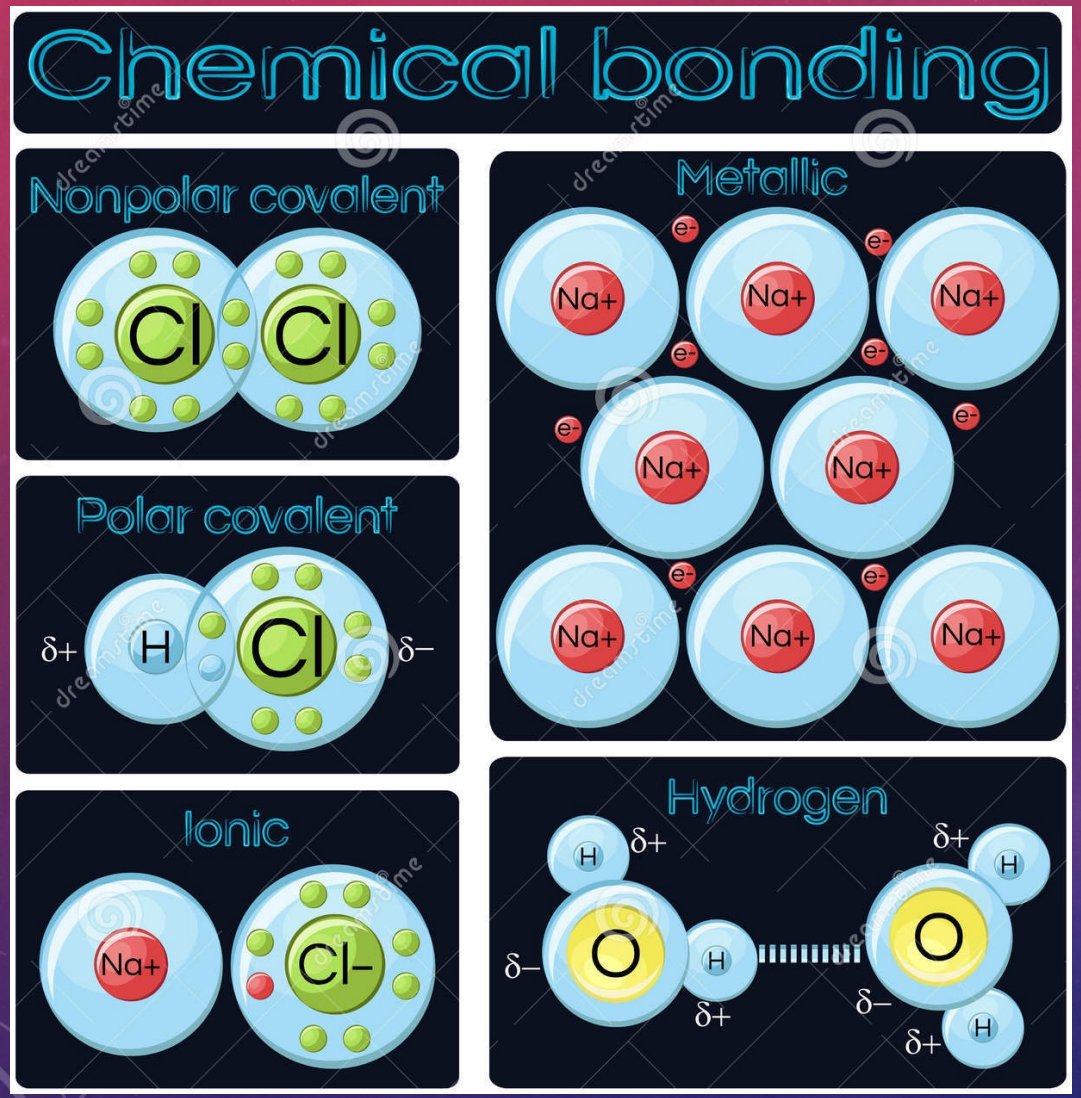
I LEGAMI CHIMICI





- I legami chimici sono quelle forze che tengono uniti gli atomi in una specie chimica oppure più molecole di una sostanza, e identificano le interazioni tra gli atomi dalle quali deriva la formazione di molecole e composti. Queste interazioni tra atomi coinvolgono prevalentemente gli elettroni più esterni dell'atomo.

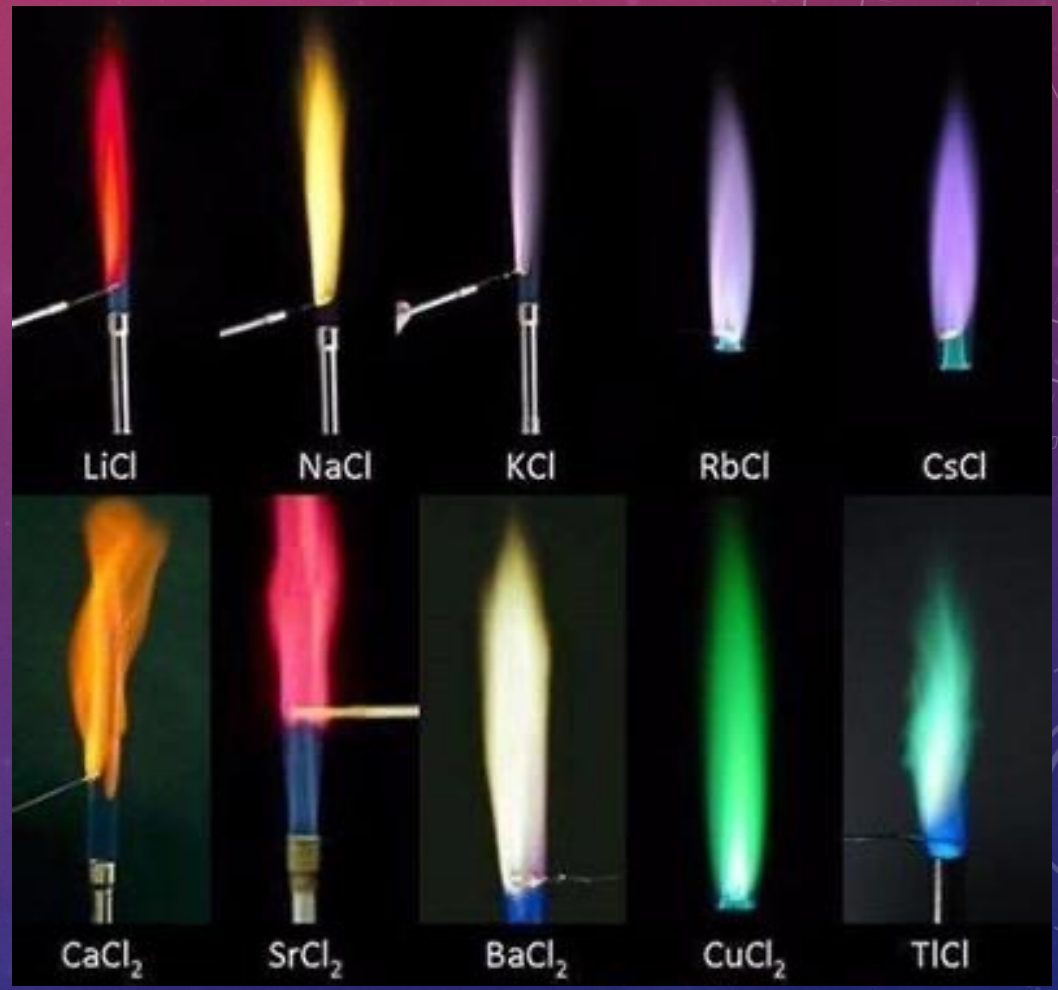
PRINCIPALI LEGAMI CHIMICI



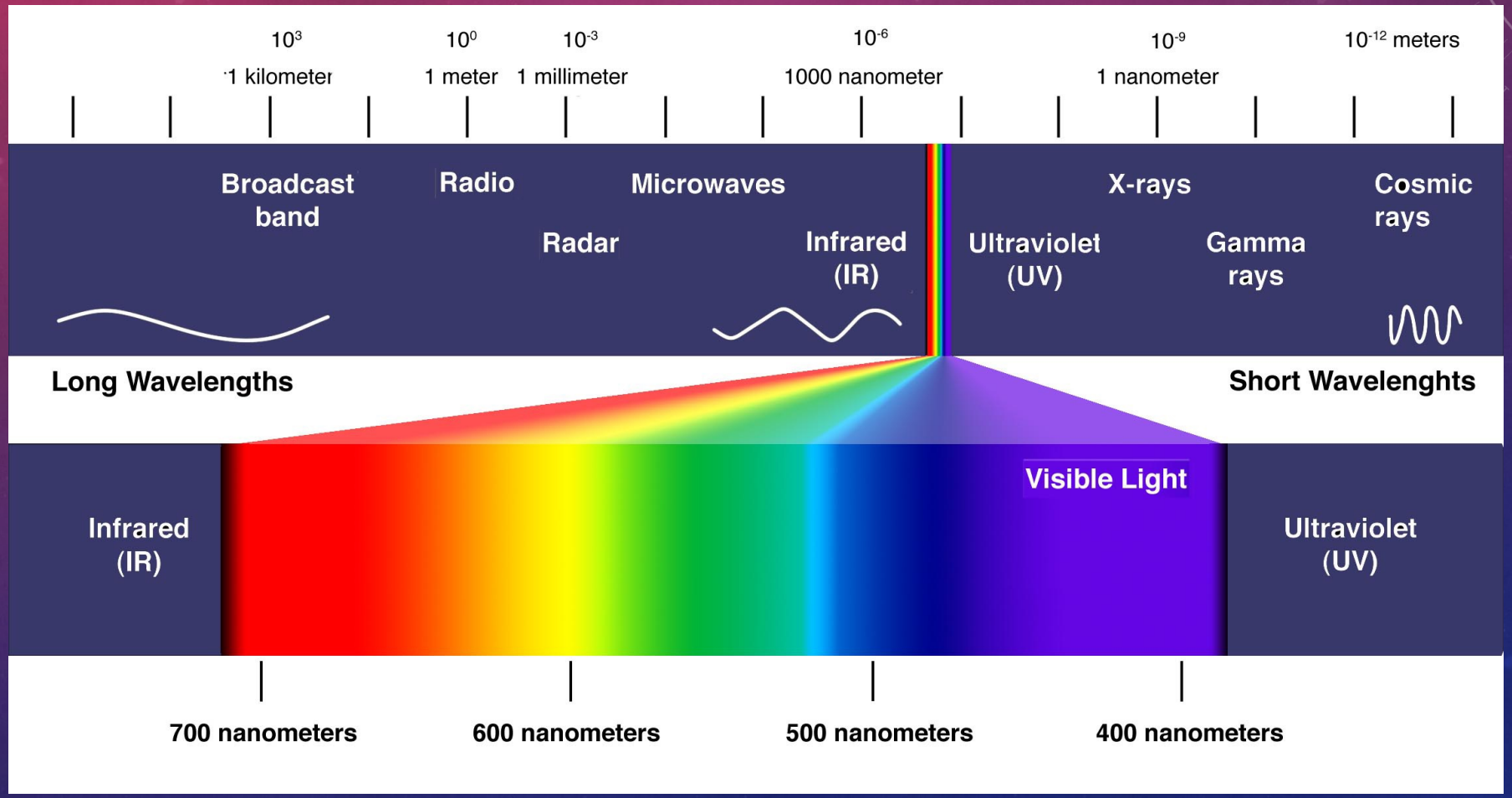
- Legame covalente puro
- Legame covalente polare
- Legame di coordinazione (o dativo)
- Legame a idrogeno (o ponte a idrogeno)
- Legame metallico
- Legame ionico

COLORI DELLE MOLECOLE E COMBUSTIONE

- Con l'utilizzo degli strumenti da laboratorio e di diversi elementi chimici (quali *litio*, *sodio*, *potassio*, *acido cloridrico*, ecc.), il relatore ci ha mostrato, tramite **combustione** con un bruciatore a gas, come le molecole assumono determinati colori.
- Ciò è dovuto al "***salto***" degli elettroni, per il quale i legami chimici si spezzano fino al termine della combustione.
- La fiamma è il prodotto di reazioni chimiche esotermiche, cioè che producono calore; il colore e la temperatura di una fiamma dipendono dalla sostanza impiegata nella combustione. Il colore di una fiamma è quindi dovuto all'emissione di radiazione elettromagnetica da parte di atomi, ioni, molecole e radicali interessati dalla reazione di combustione.
- Il riconoscimento del colore della fiamma, per esempio, è utile hai vigili del fuoco per determinare la temperatura di un incendio.

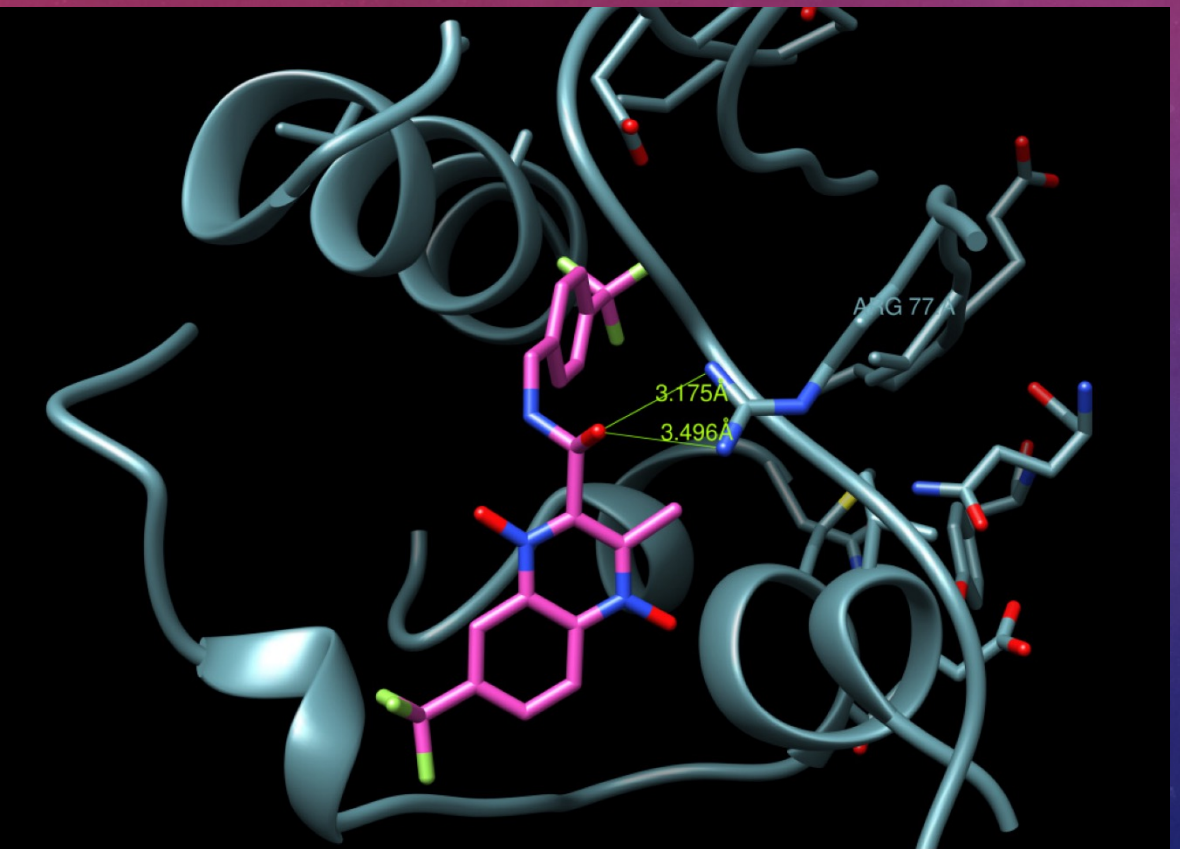


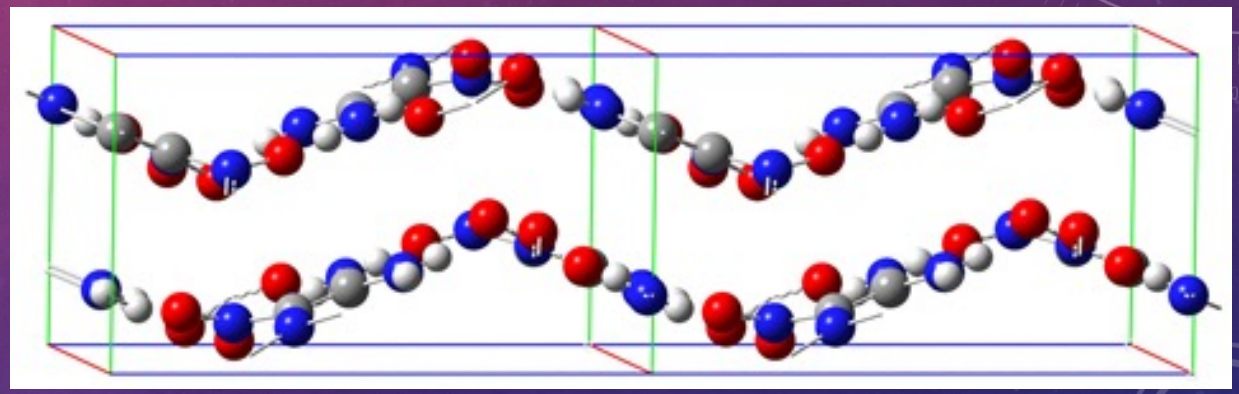
- I colori che noi vediamo sono una parte dello ***spettro elettromagnetico***, ovvero l'insieme di tutte le possibili frequenze della radiazione elettromagnetica.
- Lo spettro visibile è quella parte dello spettro elettromagnetico che comprende un intervallo di lunghezze d'onda dai 400 nm (di frequenza $8 \cdot 10^{14}$ Hz) circa del violetto ai 760/770 nm (di frequenza $4 \cdot 10^{14}$ Hz) circa del rosso.

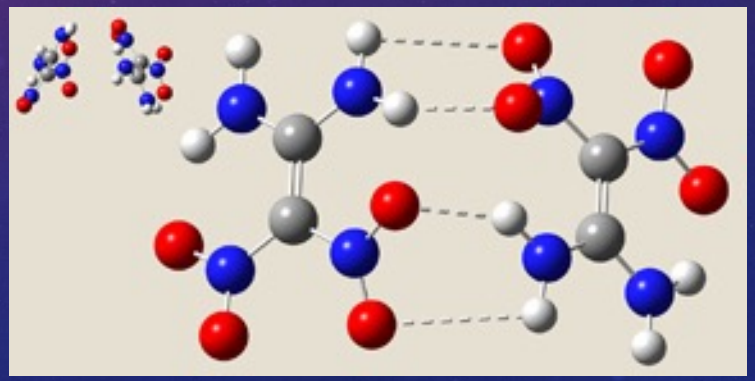


CHIMICA INFORMATICA

- Negli ultimi anni, i chimici hanno ottenuto dal progresso tecnologico e digitale sempre più strumenti per migliorare l'efficienza del proprio lavoro. Alcuni di questi strumenti, che il relatore Morelli ci ha illustrato, includono i linguaggi informatici con i quali si possono visualizzare digitalmente le molecole, diagrammi sulle radiazioni…
- Questa disciplina è detta ***chemioinformatica*** ed è l'uso del computer e delle tecniche dell'informazione, applicate ad una serie di problemi nel campo della chimica.

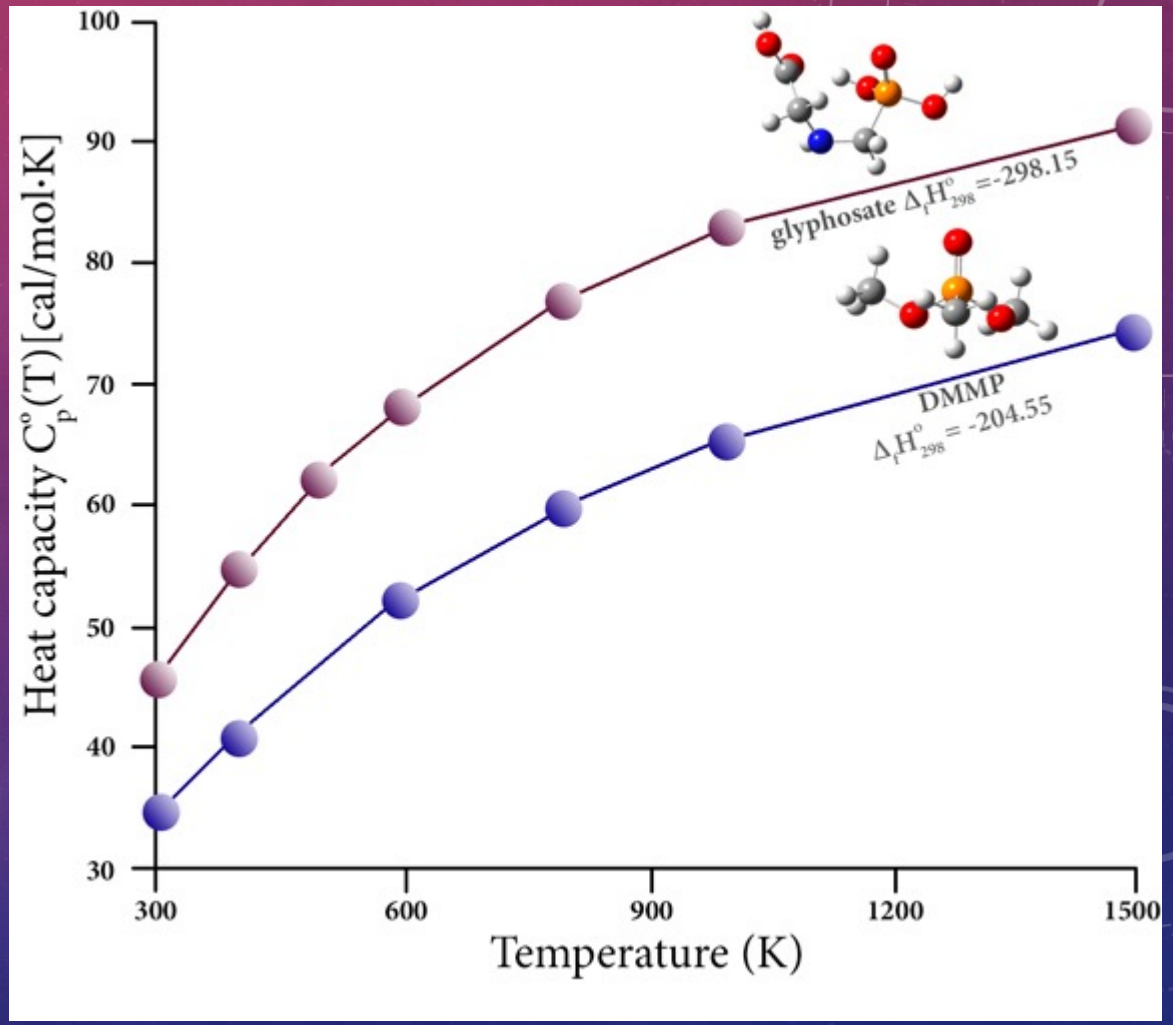




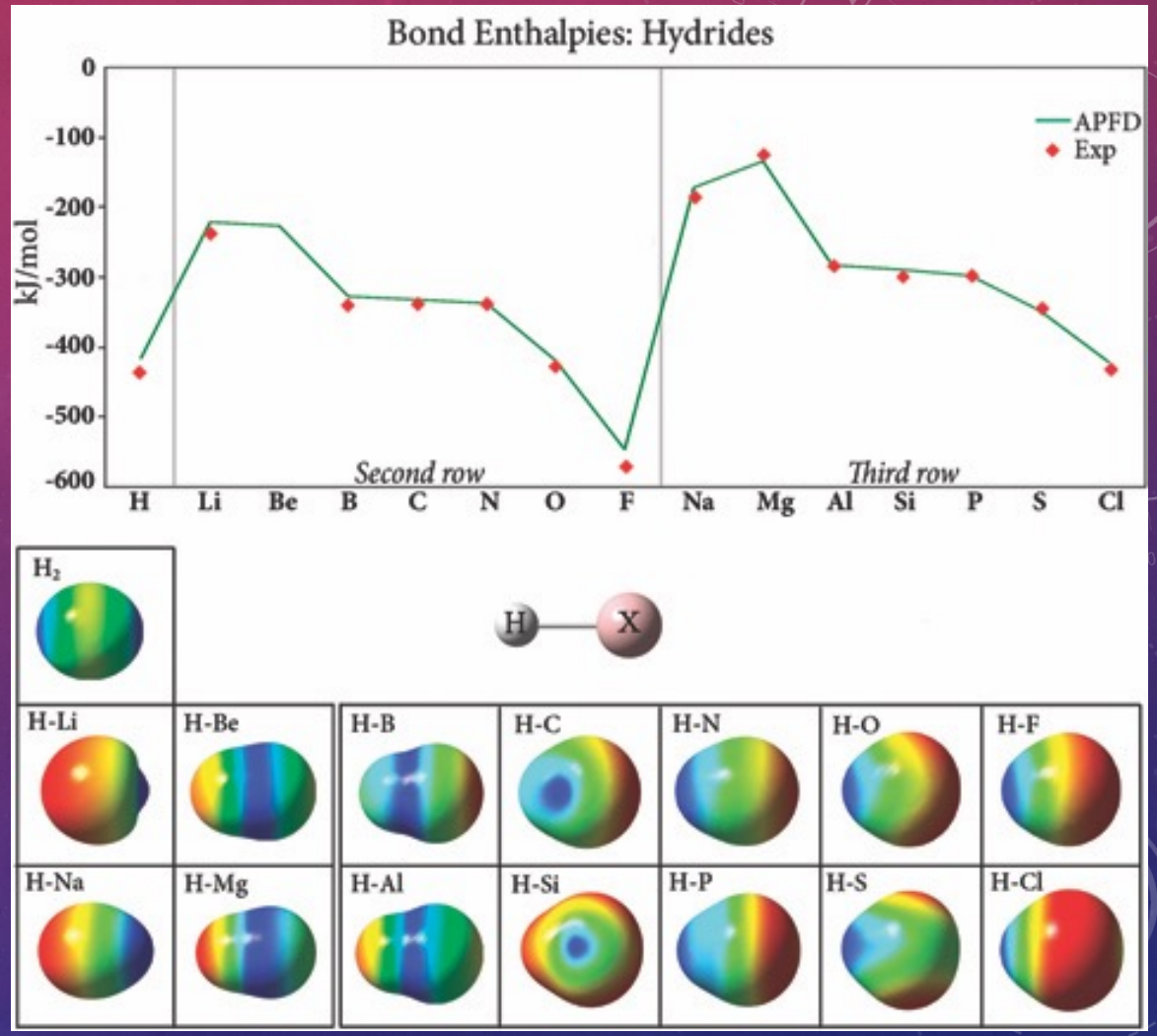


GAUSSIAN

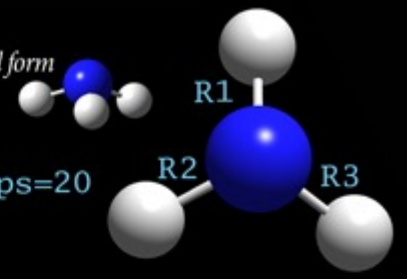
- **GAUSSIAN** (*https://gaussian.com/gaussian16/*) è un programma di chimica quantistica inizialmente pubblicato da **John Pople** e dal suo gruppo di ricerca alla Carnegie-Mellon University nel 1970 come *Gaussian70*. Da allora è in costante aggiornamento.
- La versione corrente del programma è la *Gaussian 16*.

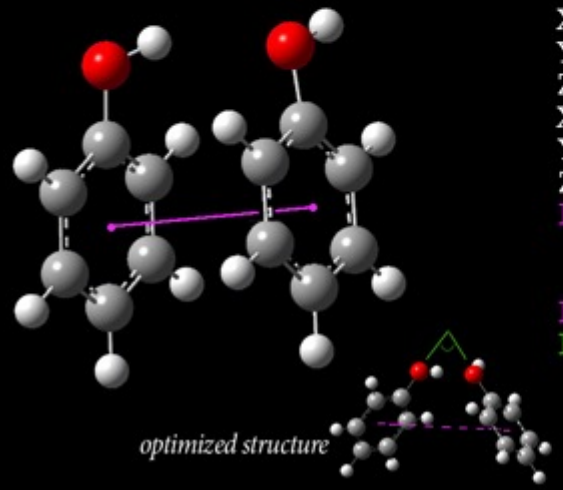


- Il nome *Gaussian* deriva dall'utilizzo da parte di Pople degli orbitali gaussiani per aumentare la velocità di calcolo, in confronto all'utilizzo degli orbitali di Slater. Questa scelta fu fatta per migliorare le performance di calcolo viste le limitate capacità computazionale dei calcolatori negli anni sessanta e settanta.
- Originariamente disponibile tramite il *Quantum Chemistry Program Exchange*, è stato in seguito distribuito da CMU e dal 1987 è sviluppato e distribuito commercialmente da Gaussian, Inc.



```
R1=B(1,2)
R2=B(1,3)
R3=B(1,4)
RF1=R1-R2 freeze
RF2=R1-R3 freeze
RSym=(R1+R2+R3)/3 StepSize=0.05 NSteps=20
```






```
XC1=XCntr(1-6) inactive
YC1=YCntr(1-6) inactive
ZC1=ZCntr(1-6) inactive
XC2=XCntr(11-21) inactive
YC2=YCntr(11-21) inactive
ZC2=ZCntr(11-21) inactive
F1F2=sqrt[(XC1-XC2)^2+
         (YC1-YC2)^2+
         (ZC1-ZC2)^2]*0.529117
F1F2(NSteps=10,StepSize=0.2)
F1F2Ang=D(1,7,20,14)
```

Gaussian 16

