



# UNIVERSITÀ DI PISA

## CHIMICA FISICA E LABORATORIO

LAURA CARBONARO

Academic year

2018/19

Course

CHIMICA PER L'INDUSTRIA E  
L'AMBIENTE

Code

122CC

Credits

6

Modules	Area	Type	Hours	Teacher(s)
CHIMICA FISICA E LABORATORIO	CHIM/02	LEZIONI	24	LAURA CARBONARO
LABORATORIO	CHIM/02	LEZIONI	45	LAURA CARBONARO

### Obiettivi di apprendimento

#### Conoscenze

Al termine del corso lo studente potrà:

capire i principi alla base della meccanica quantistica; possedere le conoscenze dei principi fondamentali che stanno alla base della interazione tra la radiazione elettromagnetica e la materia; conoscere le informazioni elementari di alcuni dei metodi spettroscopici (1H-NMR, UV-vis, IR) e sapere come applicarle ai fini della determinazione delle proprietà e della struttura di composti organici.

#### Modalità di verifica delle conoscenze

- La verifica delle conoscenze avverrà attraverso quesiti posti durante le lezioni e l'attività di laboratorio. Inoltre verrà valutato l'elaborato scritto prodotto alla fine della serie di esperienze di laboratorio

#### Capacità

Al termine del corso lo studente:

avrà una conoscenza teorica e applicativa della spettroscopia a raggi ultravioletti (UV-Vis), spettroscopia a raggi infrarossi (IR) e spettroscopia di risonanza magnetica nucleare (NMR).

Potrà:

- Identificare i componenti di uno spettrofotometro e di un fluorimetro visibile, un spettrofotometro a infrarossi, uno spettrofotometro a risonanza magnetica nucleare.
- Spiegare le informazioni ottenute da uno spettrofotometro UV-Vis e come può essere utilizzato per l'analisi quantitativa.
- Illustrare i meccanismi che danno origine alle bande di assorbimento dell'infrarosso e identificare i gruppi funzionali corrispondenti.
- dimostrare una comprensione dei processi responsabili del chimica shift NMR e della molteplicità dei segnali.
- Mettere in relazione le strutture delle molecole organiche con i dati spettroscopici

#### Modalità di verifica delle capacità

Lo studente dovrà preparare e presentare una relazione scritta che riporti i risultati dell'attività svolta durante il laboratorio

#### Comportamenti

Saranno acquisite opportune accuratezza e precisione nelle attività di preparazione e analisi spettroscopica dei campioni.

#### Modalità di verifica dei comportamenti

- Durante le sessioni di laboratorio saranno valutati il grado di accuratezza e precisione delle attività svolte
- Saranno richieste agli studenti delle brevi relazioni concernenti le esperienze di laboratorio

#### Prerequisiti (conoscenze iniziali)



## UNIVERSITÀ DI PISA

Nozioni elementari di trigonometria, calcolo algebrico e funzioni di numeri complessi. Nozioni elementari del calcolo differenziale e integrale. Nozioni elementari di meccanica classica, elettricità, magnetismo, proprietà delle onde elettromagnetiche.

### Indicazioni metodologiche

- lezioni frontali, con ausilio di slide.
- Esercitazioni in laboratorio (due o tre studenti per gruppo) assistite costantemente da personale di supporto.
- Utilizzo di siti web che propongono applets interattive riguardanti gli argomenti del corso.
- Il materiale didattico (lucidi, links ai siti web e brevi compendi alle lezioni) è disponibile sul sito del corso con accesso dalla piattaforma moodle.
- A richiesta: ricevimento degli studenti previo appuntamento tramite e-mail.

### Programma (contenuti dell'insegnamento)

La radiazione elettromagnetica (caratteristiche dello spettro delle radiazioni elettromagnetiche), la radiazione del corpo nero, l'effetto fotoelettrico, la teoria fenomenologica di Einstein della radiazione, l'emissione spontanea, l'assorbimento, l'emissione indotta, i coefficienti Einstein e il momento di transizione, le transizioni spettroscopiche, le regole di selezione.

I principi fondamentali della meccanica quantistica, della funzione d'onda, della funzione di probabilità, dell'equazione di Schrödinger. Modelli meccanici quantistici: particella in una scatola monodimensionale, rotore rigido, oscillatore armonico. Fondamenti di struttura atomica e molecolare, configurazione elettronica, forme di orbitali atomici, numeri quantici. Legame chimico, momenti di transizione (cenni)

Spettri elettronici (spettroscopia UV / Vis). Principio, tecnica sperimentale, intensità e lunghezza d'onda delle strutture e delle caratteristiche di assorbimento (influenza dei parametri interni ed esterni), l'interpretazione teorica delle transizioni elettroniche.

Spettroscopia a infrarossi (IR).

Introduzione. I principi fondamentali dell'IR, i parametri che determinano la posizione e l'intensità delle bande, le bande caratteristiche di assorbimento e i gruppi funzionali, la tecnica sperimentale, lo schema di interpretazione, l'interpretazione teorica dei movimenti vibrazionali e rotativi delle molecole.

Spettroscopia NMR, concetti di base (induzione magnetica, intensità magnetica, momento dipolo magnetico, spin di microparticelle, spostamento chimico, costanti di accoppiamento).

( $^1\text{H}$ : chimica shift, costanti di accoppiamento  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$ , relazione tra chimica shift e struttura chimica, stima degli spostamenti chimici per strutture sconosciute, caratteristiche dei principali tipi di composti. Processi dinamici e  $^1\text{H}$ -NMR. Principi fondamentali delle tecniche di impulso in NMR.

L'applicazione di metodi spettroscopici multipli nell'analisi delle strutture dei composti organici.

### Bibliografia e materiale didattico

*Bibliografia di riferimento.*

Raymond Chang, Chimica Fisica (Volume 1), Zanichelli

Modern Spectroscopy, J. Michael Hollas, Wiley

Fondamenti di spettroscopia Uv-vis, principi. Agilent Technologies

Interpretation of Infrared Spectra, A Practical Approach

John Coates Encyclopedia of Analytical Chemistry; R.A. Meyers (Ed.) pp. 10815 – 10837?

John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2000.

Lucidi delle lezioni

### Modalità d'esame

L'esame consiste in una prova scritta (della durata di circa 2h:30') ed una prova orale (facoltativa) che prevede la risoluzione di problemi numerici e domande di carattere teorico. Il voto finale sarà determinato anche sulla base dell'attività svolta in laboratorio e della presentazione scritta delle esperienze svolte. La prova finale corrisponde a 7 punti/10, l'attività di laboratorio e la relazione finale a 3 punti/10.

Ultimo aggiornamento 12/10/2018 09:41