



## UNIVERSITÀ DI PISA

---

### CHIMICA FISICA E LABORATORIO

**VALENTINA DOMENICI**

Anno accademico 2020/21  
CdS CHIMICA PER L'INDUSTRIA E L'AMBIENTE  
Codice 122CC  
CFU 6

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
CHIMICA FISICA E LABORATORIO	CHIM/02	LEZIONI	45	VALENTINA DOMENICI
LABORATORIO	CHIM/02	LABORATORI	24	VALENTINA DOMENICI

#### Obiettivi di apprendimento

##### *Conoscenze*

Al termine del corso lo studente sarà in grado di:

- capire i principi alla base della meccanica quantistica per la comprensione della struttura dell'atomo e delle molecole;
- capire i principi fondamentali che stanno alla base dell'interazione tra la radiazione elettromagnetica e la materia;
- conoscere i principi fondamentali e le principali applicazioni di alcune spettroscopie (spettroscopia atomica di assorbimento ed emissione, spettroscopia molecolare di assorbimento UV-vis, spettroscopia molecolare di emissione di fluorescenza, spettroscopia molecolare FT-IR, spettroscopia molecolare 1H NMR e 13C NMR).

##### *Modalità di verifica delle conoscenze*

- La verifica delle conoscenze avverrà attraverso quesiti posti durante le lezioni per tutta la durata del corso;
- Le conoscenze saranno anche valutate attraverso le attività di laboratorio di spettroscopia.
- Verrà valutato inoltre un elaborato scritto prodotto alla fine della serie di esperienze di laboratorio che ogni studente dovrà consegnare prima di svolgere l'esame.
- Durante il corso verranno inoltre invitati gli studenti a fare una autovalutazione delle proprie conoscenze mediante test disponibili sulla piattaforma di e-learning.

##### *Capacità*

Lo studente sarà in grado di:

- Identificare e spiegare il ruolo dei componenti di uno spettrofotometro e di un fluorimetro UV-vis, di un spettrofotometro a infrarossi (FT-IR) e di uno spettrometro di risonanza magnetica nucleare (NMR).
- Spiegare quali informazioni si possono ottenere da uno spettro di assorbimento UV-Vis e come può essere utilizzato per l'analisi quantitativa.
- Illustrare i meccanismi che danno origine alle bande di assorbimento nell'infrarosso e identificare i gruppi funzionali corrispondenti.
- Interpretare uno spettro di un composto organico incognito mediante spettroscopia FT-IR.
- Spiegare i fenomeni responsabili dello spostamento chimico e della molteplicità dei segnali di uno spettro 1H NMR e di uno spettro 13C NMR.
- Interpretare alcuni spettri 1H NMR di molecole organiche semplici.
- Mettere in relazione le strutture delle molecole organiche con i dati spettroscopici.

##### *Modalità di verifica delle capacità*

Queste conoscenze saranno valutate durante le attività laboratoriali e nei report scritti relativi alle attività svolte dagli studenti.

##### *Comportamenti*

Durante il corso e durante i laboratori didattici gli studenti dovranno interagire con l'insegnante e con i colleghi, sarà richiesta una partecipazione attiva alle esperienze.

Gli studenti dovranno quindi dimostrare di avere un atteggiamento positivo e collaborativo con i compagni.



## UNIVERSITÀ DI PISA

### Modalità di verifica dei comportamenti

Nelle attività laboratoriali gli studenti lavoreranno a gruppi secondo la modalità di cooperative learning, che sarà valutata attraverso una griglia discussa prima con gli studenti. Verrà utilizzata anche la piattaforma elearning (moodle) per le attività di autovalutazione (test ed esercitazioni). Saranno valutati anche gli atteggiamenti e l'attenzione.

### Prerequisiti (conoscenze iniziali)

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.

Per fare l'esame ci sono delle propedeuticità:

**Chimica Generale e Inorganica**

**Fisica Generale I e Laboratorio**

**Istituzioni di Matematica I**

### Indicazioni metodologiche

- Lezioni frontali (70%), con ausilio di slide, proiezioni di video e scrittura alla lavagna.
- Esercitazioni (30%) in laboratorio.
- Durante il corso, il docente proporrà anche delle attività di autovalutazione da svolgere sulla piattaforma di e-learning.
- Durante il corso, potranno essere utilizzati siti web che propongono applets interattive riguardanti alcuni argomenti del corso.
- Il materiale didattico (lucidi, links ai siti web e brevi compendi alle lezioni) saranno disponibili sul sito del corso con accesso dalla piattaforma moodle di e-learning.
- Il docente è disponibile per ricevimenti individuali o di gruppo previo appuntamento tramite e-mail (o tramite la piattaforma e-learning).

### Programma (contenuti dell'insegnamento)

Richiamo dei concetti alla base dell'interazione luce-materia e delle relazioni tra proprietà molecolari e proprietà macroscopiche della materia. I principi della Meccanica Quantistica e legame con le caratteristiche strutturali dell'atomo e delle molecole. Aspetti storici rilevanti ed esperimenti fondamentali (la radiazione del corpo nero, l'effetto fotoelettrico, l'effetto Compton, ...). La quantizzazione dell'energia. Lo spettro elettromagnetico e le righe spettrali di emissione e di assorbimento atomico. Aspetti fondamentali della spettroscopia atomica (concetti di emissione spontanea, emissione indotta, coefficienti di Einstein, ...). Il dualismo onda-particella e le proprietà peculiari delle radiazioni elettromagnetiche. La funzione d'onda. L'interpretazione di Bohr della funzione d'onda. L'equazione di Schrödinger. Il principio di indeterminazione. Modelli quantistici per sistemi particolari: particella in una scatola monodimensionale; il rotore rigido, l'oscillatore armonico. Fondamenti della struttura atomica e degli spettri atomici (energie, orbitali, configurazione elettronica e regole di selezione). Aspetti storici legati alla spettroscopia delle stelle e alla scoperta di alcuni elementi chimici. Alcuni aspetti sperimentali: la larghezza di riga e le eccezioni alle regole di selezione. Fondamenti della struttura molecolare. Il legame chimico. La teoria degli orbitali molecolari. La teoria del legame di valenza. L'approssimazione di Born-Oppenheimer e la separazioni dei moti. Cenni alle teorie e alle approssimazioni per la trattazione di molecole poliatomiche. Cenni alla simmetria molecolare e alla classificazione in base alle proprietà di simmetria. Conseguenze e applicazioni esemplificative alla spettroscopia. Spettroscopia molecolare nel visibile (vis) e ultravioletto (UV). Principi teorici e aspetti sperimentali associati alla spettroscopia molecolare di assorbimento UV-vis. Legame tra struttura molecolare di composti organici e caratteristiche spettrali. La larghezza di riga, la struttura degli spettri e la lunghezza d'onda delle bande di assorbimento. Principi della spettroscopia di emissione di fluorescenza e di fosforescenza. Principi fondamentali di funzionamento dello spettrofotometro UV-vis e dello spettrofluorimetro. Casi di studio e applicazioni. Spettroscopia nella regione delle radiazioni infrarosse (IR). I principi fondamentali della spettroscopia vibrazionale e rotazionale. Cenni alla spettroscopia Raman. Le transizioni rotazionali e vibrazionali, le regole di selezione. Esempi di spettri rotazionali puri, vibrazionali e roto-vibrazionali. Legame tra posizione e intensità delle bande e caratteristiche strutturali di molecole poliatomiche. Le bande caratteristiche IR dei gruppi funzionali di molecole organiche. Aspetti fondamentali del funzionamento di uno spettrofotometro IR e FT-IR. Casi di studio e applicazioni.

Spettroscopia di risonanza magnetica nucleare (NMR). Evoluzione storica di questa spettroscopia e delle sue principali applicazioni. Esperimenti fondamentali e definizione dei concetti di base. Effetto dei campi magnetici su elettroni e su atomi. Spin nucleare e momento magnetico nucleare. Le transizioni energetiche nucleari. Aspetti fondamentali per l'interpretazione degli spettri NMR: lo spostamento chimico, l'accoppiamento scalare, l'accoppiamento dipolare, l'effetto quadrupolare, il rilassamento di spin. Principi di funzionamento di uno spettrometro NMR e dell'acquisizione dei segnali in Trasformata di Fourier. Esperimenti monodimensionali NMR al  $^1\text{H}$  e al  $^{13}\text{C}$  di composti organici e interpretazione degli spettri. Esperimenti di base per la misura dei tempi di rilassamento  $^1\text{H}$  e informazioni sui moti molecolari. Applicazione di metodi spettroscopici bidimensionali e multidimensionali per l'analisi delle strutture molecolari di composti complessi e di macromolecole (cenni).

### Bibliografia e materiale didattico

Testi consigliati:

- P. Atkins, **Chimica fisica** (Quinta edizione italiana condotta sulla nona edizione inglese), Zanichelli
- W. Moore, **Chimica fisica**, Piccin Ed.
- J. Michael Hollas, **Modern Spectroscopy**, Wiley
- R. M. Silverstein, F. X. Webster e D. J. Kiemle, **Identificazione spettrometrica dei composti organici**, Zanichelli

### Indicazioni per non frequentanti

La frequenza alle lezioni ed alle esercitazioni di laboratorio è obbligatoria.



## UNIVERSITÀ DI PISA

---

### Modalità d'esame

- L'esame è composto da una prova scritta ed una prova orale. Per accedere alla prova scritta gli studenti devono aver consegnato le relazioni scritte sulle esperienze di laboratorio e devono aver avuto un giudizio positivo sulla relazione consegnata.
- La prova scritta si consiste in più domande / esercizi da risolvere in un tempo massimo di 2 ore e mezza.
- La prova scritta è superata se il punteggio totale raggiunge la sufficienza (18/30).
- La prova orale consiste in un colloquio con lo studente sui vari argomenti del corso. La prova orale non è superata se il candidato non risponde correttamente, esprimendosi in modo chiaro e usando la terminologia corretta, alle domande sui concetti principali presentati nel corso.
- L'esito (voto) finale dell'esame è il risultato di una valutazione complessiva, che terrà conto: 1) dell'attività di laboratorio e delle relazioni di laboratorio (per 2/10); 2) dell'esito della prova scritta (per 4/10) e dell'esito della prova orale (per 4/10).

### Altri riferimenti web

Pagina di elearning: <https://polo3.elearning.unipi.it/course/view.php?id=2760>

### Note

*Ultimo aggiornamento 14/09/2020 13:26*