



UNIVERSITÀ DI PISA

CHIMICA FISICA E LABORATORIO

VALENTINA DOMENICI

Anno accademico 2019/20
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	24	VALENTINA DOMENICI
LABORATORIO	CHIM/02	LEZIONI	45	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 in laboratorio.

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.

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 (tre o quattro studenti per gruppo, con divisione dei ruoli a rotazione) assistite costantemente da personale di supporto.
- 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 separazione 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 ^1H e al ^{13}C di composti organici e interpretazione degli spettri. Esperimenti di base per la misura dei tempi di rilassamento ^1H 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



UNIVERSITÀ DI PISA

La frequenza alle lezioni ed alle esercitazioni di laboratorio è obbligatoria. La frequenza alle lezioni è un requisito necessario per l'ammissione al laboratorio.

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 30 minuti.
- 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).

Ultimo aggiornamento 08/08/2019 12:19