

## SYLLABUS DEL CORSO

### Chimica Fisica III e Laboratorio

2122-3-E2702Q097

---

#### Obiettivi

Fornire agli studenti una introduzione ai principi chimico fisici della spettroscopia molecolare e descrivere i principi di funzionamento e le parti tecniche dei quali sono composti i principali spettrofotometri.

#### Conoscenze e capacità di comprensione

Al termine del corso lo studente conosce:

- le relazioni che intercorrono tra la spettroscopia e la meccanica quantistica
- i principali modelli quantomeccanici per interpretare gli spettri vibrazionali e rotazionali
- un metodo classico di descrizione del principio di funzionamento della spettroscopia Raman che permette una corretta interpretazione degli spettri Raman
- i principi di funzionamento dei vari componenti di uno spettrofotometro (sorgenti, separatori di lunghezze d'onda e rivelatori) e le relazioni con i principi di interazione radiazione materia

#### Conoscenza e capacità di comprensione applicate

Al termine del corso lo studente è in grado di:

- analizzare criticamente spettri vibrazionali, rotazionali e Raman
- ricavare da essi informazioni su proprietà chimico fisiche delle molecole e non solo informazioni analitiche

- interfacciarsi con i principali strumenti di spettroscopia ed utilizzarli in maniera consapevole e corretta

### **Autonomia di giudizio**

Al termine del corso lo studente è in grado di:

- scegliere il metodo spettroscopico più appropriato per lo studio del sistema di interesse;

- analizzare correttamente e criticamente uno spettro anche in relazione alla modalità di raccolta e alle caratteristiche tecniche dello strumento usato

### **Abilità comunicative**

Saper descrivere in una relazione tecnica in modo chiaro e sintetico ed esporre oralmente con proprietà di linguaggio gli obiettivi, il procedimento ed i risultati delle analisi ed elaborazioni effettuate.

### **Capacità di apprendere**

Essere in grado di applicare le conoscenze acquisite a contesti differenti da quelli presentati durante il corso, e di distinguere tra un uso analitico ed un uso chimico fisico della spettroscopia.

### **Contenuti sintetici**

Descrizione e interpretazione degli spettri rotazionali, vibrazionali e Raman mediante meccanica quantistica attraverso modelli semplici. Raccolta ed analisi di spettri vibrazionali, rotazioni e di emissione e Raman di soluzioni e/o gas durante la parte di esercitazioni in laboratorio didattico

### **Programma esteso**

Spettri molecolari rotazionali. Spettri molecolari vibrazionali. Spettri rotovibrazionali, stati roto-vibrazionali nell'approssimazione di Born-Oppenheimer e determinazione quantitativa di parametri strutturali. Spettroscopia Raman. Spettroscopia elettronica, Probabilità di transizione e regole di selezione. Esecuzione di almeno tre esperienze di spettroscopia e di elaborazione dati sui seguenti argomenti: determinazione di distanze di legame mediante analisi degli spettri rotovibrazionali, misure di assorbimento nell'UV-visibile per la determinazione di transizioni elettroniche, utilizzo della spettroscopia Raman per determinare proprietà vibrazionali di molecole. Aspetti tecnici degli strumenti che verranno utilizzati nella parte di laboratorio.

### **Prerequisiti**

Chimica Fisica II (in particolare La teoria della meccanica quantistica: principi e applicazioni , Equazione di Schrodinger). Fisica II (in particolare onde elettromagnetiche e loro interazione)

## **Modalità didattica**

L'insegnamento prevede 4 CFU di lezioni frontali e 2 CFU esercitazioni in laboratorio. Nel laboratorio viene assegnato agli studenti, suddivisi in piccoli gruppi, il compito di raccogliere ed elaborare degli spettri con diversi spettrofotometri utilizzando le metodologie presentate nelle lezioni teoriche. Vengono anche proposte le metodiche per produrre un elaborato chiaro nel procedimento e accurato

## **Materiale didattico**

C. N. Banwell "Fundamentals of Molecular spectroscopy" 3<sup>rd</sup> Edition McGraw Hill Book Company

Dispensa "Guida alle esperienze di spettroscopia" S. Binetti- C. Greco (fornita dal docente )

## **Periodo di erogazione dell'insegnamento**

Terzo anno primo semestre

## **Modalità di verifica del profitto e valutazione**

L'esame consiste in una prova orale preceduta da una consegna di una relazione scritta sulle esperienze di laboratorio. Per la stesura della relazione è indicato nella pagina elearning un format da seguire. La relazione può essere una per gruppo di lavoro o singola e va consegnata almeno una settimana prima della data di appello al docente del corso. La relazione verrà valutata in trentesimi e peserà per un terzo nel voto complessivo.

Al termine della lezioni frontali è prevista una prova parziale sui contenuti delle lezioni frontali. Tale prova parziale è scritta con di norma 4 o 5 domande aperte. Se gli studenti superano questa prova parziale con un voto superiore a 22/30 durante l'esame finale se vogliono possono essere valutati solo sulla relazione e sulla parte relativa alle esperienze e al principio di funzionamento degli spettrofotometri. La valutazione delle prove tiene conto della completezza ed esattezza delle risposte, nonché' della chiarezza nella presentazione.

Il voto finale, espresso in trentesimi con eventuale lode, e' dato dalla media pesata della prova orale o parziale e della relazione

A richiesta di studenti Erasmus gli esami possono essere fatti in lingua inglese

## **Orario di ricevimento**

Tutti i giorni su prenotazione tramite e-mail

---