

## COURSE SYLLABUS

### Physical Chemistry III and Laboratory

2425-3-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.

#### **D1 Conoscenze e capacità di comprensione**

Al termine del corso lo studente dovrà dimostrare di essere in grado di conoscere:

- 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)

#### **D2 Capacità di applicare conoscenza e comprensione**

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

#### **D3 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

#### **D4 Abilità comunicative**

Saper descrivere in forma scritta ( 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 sperimentazioni effettuate.

#### **D5 Capacità di apprendere**

Risultati attesi: 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. Elementi di Scientific Writing e Data Analysis (utilizzo di software per l'analisi dei dati, per la creazione della bibliografia e impaginazione di testi scientifici tramite latex).

## **Prerequisiti**

Chimica Fisica II (in particolare La teoria della meccanica quantistica: principi e applicazioni , Equazione di Schroedinger). 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 ed accurato, attraverso l'esplorazione di un articolo/ testo scientifico. Ore di esercitazioni vengono dedicate anche alla stesura delle relazioni con il supporto dei docenti. In queste ore viene spiegato l'utilizzo di software specifici per l'analisi dei dati, per la creazione della bibliografia e l' impaginazione di testi scientifici tramite latex.

Didattica Erogativa : 14 lezioni in presenza da 2 ore ciascuna Tot. 28 ore

Didattica Partecipativa : 6 attività in laboratorio di 4 ore ciascuna Tot. 24 ore

## **Materiale didattico**

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

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

Terzo anno primo semestre

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

La verifica dell'apprendimento dei risultati previsti dai descrittori D1-D5 viene effettuata mediante un colloquio e mediante la correzione di una relazione scritta sulle esperienze condotte in laboratorio. Per la corretta stesura della relazione sono indicate nella pagina elearning delle linee guida da seguire e un format. La relazione può essere una per gruppo di lavoro o singola e va consegnata una settimana prima della data di appello ai docenti di laboratorio secondo le modalità riportate sulla pagina elearning.

Il colloquio, oltre ad accertare l'acquisizione di conoscenze e competenze disciplinari, tenderà a verificare le capacità di analisi critica, l'autonomia di giudizio e le capacità espositive dello studente o studentessa. La votazione finale del solo colloquio, viene graduata secondo il criterio seguente:

18-20: preparazione su un numero ridotto di argomenti presenti nel programma del corso, con capacità di trattazione e analisi limitate che emergono solo a seguito dell'aiuto e delle domande del docente; competenza espositiva e lessico non sempre corretti, capacità di elaborazione critica limitata;

21-23: preparazione su una parte degli argomenti presenti nel programma del corso, capacità di analisi autonoma solo su questioni puramente pratiche ed esecutive, uso di un lessico corretto anche se non del tutto accurato e chiaro e di una capacità espositiva a tratti incerta;

24-27: preparazione su un numero ampio di argomenti trattati nel programma del corso, capacità di svolgere in modo autonomo l'argomentazione e l'analisi critica, capacità di applicazione delle conoscenze ai contesti e collegamento dei temi a casi concreti, uso di un lessico corretto e competenza nell'uso del linguaggio disciplinare;

28 – 30: preparazione completa sugli argomenti in programma d'esame, capacità personale di trattazione autonoma e di analisi critica dei temi, capacità di riflessione e di collegamento dei temi a casi concreti e a diversi contesti, capacità di pensiero critico e autonomo, padronanza del lessico disciplinare e di una capacità espositiva rigorosa e articolata, capacità di argomentazione e riflessione, capacità di collegamenti ad altre discipline;

30L: preparazione completa ed esaustiva sugli argomenti in programma d'esame, capacità personale di trattazione autonoma e di analisi critica dei temi, capacità di riflessione e autoriflessione e di collegamento dei temi a casi concreti e a diversi contesti, ottima capacità di pensiero critico e autonomo, piena padronanza del lessico disciplinare e di una capacità espositiva rigorosa e articolata, capacità di argomentazione, riflessione e di autoriflessione, capacità di collegamenti ad altre discipline.

La relazione scritta valutata anch'essa in trentesimi e graduata secondo il criterio seguente :

8-20: relazione che affronta solo una parte limitata delle esperienze di laboratorio, con una descrizione sommaria e poco dettagliata; presenza di imprecisioni metodologiche e interpretative; esposizione poco chiara, con un linguaggio tecnico non sempre corretto; capacità di analisi e riflessione critica minime o assenti. Grafici e figure o poco pertinenti o scarsamente comprensibili. Assenza o uso inadeguato delle fonti bibliografiche.

21-23: relazione che tratta una parte delle esperienze di laboratorio con una descrizione generalmente corretta ma superficiale; applicazione limitata del metodo scientifico e difficoltà nell'interpretazione dei dati; esposizione comprensibile ma con alcune imprecisioni terminologiche; capacità di analisi autonoma ristretta ad aspetti pratici ed esecutivi. Grafici e figure presenti ma non sempre ben realizzati o poco commentati. Bibliografia limitata, o non sempre pertinente o non correttamente riportata

24-27: relazione che affronta in modo completo le esperienze di laboratorio, con un'esposizione strutturata e corretta; adeguata applicazione del metodo scientifico e interpretazione consapevole dei dati; capacità di collegamento con i concetti teorici trattati nel corso; uso appropriato del linguaggio tecnico e una buona chiarezza espositiva. Grafici e figure ben realizzati e utilizzati in modo efficace per supportare l'analisi. Bibliografia presente a volte ben riportata in modo corretto

28-30: relazione approfondita e ben strutturata, con una trattazione rigorosa delle esperienze di laboratorio e un'interpretazione critica dei dati; capacità di collegare i risultati sperimentali ai concetti teorici e ad altri ambiti disciplinari; uso preciso e articolato del linguaggio scientifico; esposizione chiara, logica e coerente. Grafici e figure accurati, ben etichettati e interpretati in maniera corretta. Bibliografia presente, utilizzata e riportata in modo pertinente.

30L: relazione eccellente, completa ed esaustiva, con una trattazione autonoma e critica delle esperienze di laboratorio; analisi approfondita e riflessione originale sui dati sperimentali, uso ottimo del linguaggio scientifico e un'esposizione chiara, rigorosa e articolata. Grafici e figure di alta qualità, integrati in modo efficace nell'analisi e accompagnati da una discussione approfondita. Bibliografia presente, utilizzata e riportata in modo pertinente.

La votazione complessiva sarà la media pesata sui CFU della parte frontale e della parte di laboratorio della votazione riferita al colloquio orale e la votazione della relazione scritta

E' presente una prova in itinere facoltativa al termine della lezioni frontali durante la pausa didattica di Novembre. La prova in itinere verte sul programma trattato durante le lezioni frontali ad eccezione degli argomenti che si riferiscono ai principi di funzionamento degli spettrofotometri presenti in laboratorio e dei relativi componenti e alle descrizione e modalità di svolgimento delle esperienze.. Tale prova in itinere è scritta e consta di 4 domande aperte . Per ognuna di queste domande è specificato il massimo peso in trentesimi . La valutazione della risposta ad ogni singola domanda tiene conto della completezza ed esattezza delle risposte, nonché' della chiarezza nella descrizione scritta. Se gli studenti superano la prova in itinere se vogliono possono sostenere il colloquio solo sulla parte di programma non oggetto della prova parziale (e cioè solo sui principi di funzionamento e i componenti degli spettrofotometri strumenti presenti in laboratorio e sulle modalità di svolgimento delle esperienze). E' comunque lasciata facoltà dello studente decidere al momento dell'orale se mantenere la valutazione ottenuta nella prova in itinere o sostenere il colloquio su tutti gli argomenti dell'insegnamento.

A richiesta di studenti Erasmus possono sostenere la prova in itinere, il colloquio e la scrittura della relazione in lingua inglese

## **Orario di ricevimento**

Tutti i giorni su prenotazione tramite e-mail

## **Sustainable Development Goals**

ISTRUZIONE DI QUALITÀ | PARITÀ DI GENERE

---