

CORSO DI STUDIO: Triennale in Scienze Chimiche – L27

ANNO ACCADEMICO: 2023/2024

DENOMINAZIONE DELL'INSEGNAMENTO: Laboratorio di Chimica fisica II

Principali informazioni sull'insegnamento	
Anno di corso	<i>Il anno</i>
Periodo di erogazione	<i>Il semestre (Marzo-Giugno)</i>
Crediti formativi universitari (CFU/ETCS):	4
SSD	CHIM/02
Lingua di erogazione	Italiano
Modalità di frequenza	Frequenza obbligatoria

Docente	
Nome e cognome	<i>Luigi Gentile</i>
Indirizzo mail	<i>luigi.gentile@uniba.it</i>
Telefono	<i>+39 0805442033</i>
Sede	<i>Dipartimento di Chimica, Università di Bari, Via Edoardo Orabona, 4, Bari</i>
Sede virtuale	<i>Microsoft Teams</i>
Ricevimento	<i>Contattare tramite email per fissare un appuntamento (in generale dal martedì e mercoledì pomeriggio)</i>

Organizzazione della didattica			
Ore			
Totali	Didattica frontale	Pratica (laboratorio, campo, esercitazione, altro)	Studio individuale
100	16	30	54
CFU/ETCS			
4	2	2	

Obiettivi formativi	<p><i>1. Conoscenza e comprensione.</i> <i>Lo scopo del corso è di fornire i fondamenti per la comprensione della struttura atomica e molecolare e della loro interazione con la radiazione elettromagnetica.</i></p> <p><i>2. Capacità di applicare conoscenza e comprensione.</i> <i>Al termine del corso lo studente sarà in grado di: (i) familiarizzazione con alcune tecniche spettroscopiche (assorbimento UV-visibile; Fluorescenza; FT-IR: polarimetria); (ii) Interpretazione dei dati spettroscopici e loro utilizzo per ricavare parametri molecolari.</i></p>
Prerequisiti	<i>Conoscenze di base della Chimica-Fisica: Cinetica e Termodinamica</i>

<p>Metodi didattici</p>	<p>Lezioni Frontali: Spiegazione dei concetti chiave attraverso lezioni tradizionali frontali, utilizzando diagrammi, grafici e modelli visivi per chiarire i concetti astratti.</p> <p>Attività Laboratori: Esperimenti di laboratorio che dimostrano i principi della chimica fisica (spettroscopia e cinetica) nella pratica. Questo permetterà agli studenti di vedere i concetti in azione e di acquisire esperienza pratica.</p> <p>Discussioni di Gruppo: Far discutere gli studenti in piccoli gruppi sulle esperienze di laboratorio. Per favorire la collaborazione e stimola il pensiero critico.</p> <p>Studio Individuale: Assegnando la stesura delle relazioni di laboratorio che permettono agli studenti di approfondire argomenti specifici dell'insegnamento.</p> <p>Problem-Solving: Fornendo esempi di problemi e incoraggiando gli studenti a risolverli, applicando i concetti appresi. Verranno fornite le slides delle lezioni ricche di esempi. Questo migliorerà le loro capacità di risoluzione dei problemi e la comprensione pratica della teoria.</p>
<p>Risultati di apprendimento previsti</p> <p>DD1 Conoscenza e capacità di comprensione</p> <p>DD2 Conoscenza e capacità di comprensione applicate</p> <p>DD3-5 Competenze trasversali</p>	<ul style="list-style-type: none"> ○ Descrittore di Dublino 1: conoscenza e capacità di comprensione; Gli studenti acquisiranno conoscenze approfondite sulle teorie e i principi della <ul style="list-style-type: none"> ○ cinetica chimica, ○ polarimetria ○ spettroscopia, Comprendendo i concetti teorici di base sottostanti alle reazioni chimiche e alle transizioni spettroscopiche. Saranno in grado di comprendere e spiegare i fenomeni molecolari coinvolti nelle reazioni e nelle interazioni con la radiazione elettromagnetica. ○ Descrittore di Dublino 2: capacità di applicare conoscenza e comprensione; Gli studenti applicheranno le conoscenze acquisite per condurre esperimenti di laboratorio complessi, utilizzando tecniche come il metodo <ul style="list-style-type: none"> ○ dell'orologio chimico, ○ la polarimetria ○ diverse tecniche spettroscopiche (UV-Vis, IR e fluorescenza). Saranno in grado di interpretare i dati sperimentali, analizzare gli spettri e comprendere le implicazioni pratiche delle reazioni chimiche e delle interazioni molecolari studiate. <ul style="list-style-type: none"> ○ Competenze Sperimentali: Gli studenti svilupperanno competenze pratiche nell'esecuzione di esperimenti di laboratorio, acquisendo abilità nel utilizzo di strumenti scientifici (UV-Vis, IR, Spettrofluorimetro) e nell'interpretazione dei risultati sperimentali. ○ Competenze di Analisi: Gli studenti saranno in grado di analizzare dati complessi derivanti dagli esperimenti, applicando principi matematici e concetti teorici (cinetica e spettroscopia) per interpretare gli spettri e comprendere i comportamenti molecolari. - Descrittore di Dublino 3: capacità critiche e di giudizio; <ul style="list-style-type: none"> - Autonomia di giudizio ○ Competenze di Risoluzione dei Problemi: Gli studenti affronteranno problemi teorici e pratici legati alle reazioni chimiche e alle transizioni spettroscopiche, applicando le loro conoscenze per risolvere sfide scientifiche complesse. - Descrittore di Dublino 4: capacità di comunicare quanto si è appreso; - Abilità comunicative

	<ul style="list-style-type: none"> ○ <i>Competenze di Comunicazione: Gli studenti impareranno a comunicare in modo chiaro e coerente i risultati delle loro ricerche attraverso relazioni di laboratorio e discussioni, sviluppando competenze di comunicazione scientifica.</i> - Descrittore di Dublino 5: <i>capacità di proseguire lo studio in modo autonomo nel corso della vita;</i> - <i>Capacità di apprendere in modo autonomo</i> <p><i>Al termine dell'insegnamento lo/la studente/studentessa dovrà essere in grado di</i></p> <ul style="list-style-type: none"> ○ <i>Determinare leggi cinetiche tramite approcci sperimentali.</i> ○ <i>Utilizzare tecniche spettroscopiche per ottenere informazioni sulla natura chimica delle sostanze, ottenere parametri molecolari da tecniche spettroscopiche e comprendere le transizioni atomiche e molecolari.</i> ○ <i>Riportare e analizzare i dati in una relazione.</i>
--	--

Contenuti di insegnamento (Programma)	<p>1. ELEMENTI DI CINETICA CHIMICA Velocità di reazione e ordine di reazione; metodo dell'isolamento di uno dei reagenti, metodo delle velocità iniziali e metodo dell'integrazione dell'equazione cinetica. Le reazioni di ordine zero, del primo, del secondo ordine; determinazione dell'ordine di reazione; dipendenza della velocità dalla temperatura. <u>Esperienza di laboratorio:</u> Studio cinetico di reazioni con il metodo dell'orologio chimico: reazione ioduro-acqua ossigenata in ambiente acido.</p> <p>2. POLARIMETRIA Polarizzazione circolare ed ellittica della radiazione elettromagnetica; Il raggio ordinario e straordinario; il potere rotatorio. Studio cinetico per via polarimetrica: misura del potere rotatorio con il polarimetro; reazione di idrolisi del saccarosio in ambiente acido. <u>Esperienza di laboratorio:</u> La reazione di idrolisi del saccarosio.</p> <p>3. INTRODUZIONE ALLA SPETTROSCOPIA <i>La radiazione elettromagnetica e la sua interazione con la materia; l'equazione differenziale di Schrödinger; l'approssimazione di Born-Oppenheimer; i livelli energetici molecolari; Intensità di una transizione spettroscopica; la legge di Lambert-Beer; la probabilità di transizione; la popolazione dei livelli energetici (la distribuzione di Boltzmann).</i></p> <p>3.1 <i>Spettroscopia rotazionale di molecole biatomiche: richiami di meccanica classica e quantistica; termine spettroscopico; popolazione dei livelli rotazionali; transizioni rotazionali; modello del rotatore rigido; le regole di selezione; modello del rotatore elastico.</i></p> <p>3.2 <i>Spettroscopia roto-vibrazionale di molecole biatomiche: Modello dell'oscillatore armonico (descrizione classica e quantistica); vibrazioni molecolari anarmoniche; determinazione della costante di anarmonicità; breakdown dell'approssimazione di Born-Oppenheimer; accenni di spettroscopia Raman; Lo spettrometro ad Infrarossi; Interferometro di Michaelson.</i> <u>Esperienza di laboratorio:</u> <i>Spettro roto-vibrazionale di HCl e CO. Registrazione dello spettro IR di un campione gassoso tramite spettrofotometro FT-IR. Interpretazione dello spettro roto-vibrazionale. Effetti di stiramento centrifugo, anarmonicità, l'accoppiamento vibro-rotazionale. Il potenziale di Morse. Overtone. Struttura rotazionale della transizione fondamentale: ramo R e ramo P.</i></p> <p>3.3 <i>Spettroscopia UV-Vis: l'approssimazione orbitalica; i termini spettroscopici; le regole di selezione; LUMO e HOMO; le molecole poliatomiche e le transizioni elettroniche; effetti di gruppi funzionali e solventi sugli spettri elettronici; l'elettrone nella scatola; dieni e cianine; lo spettrofotometro UV-Vis.</i> <u>Esperienza di laboratorio:</u> <i>Spettri elettronici di sostanze con doppi legami coniugati; determinazione della lunghezza del legame C-C in composti con doppi legami coniugati; coloranti del gruppo delle cianine e derivati del butadiene. Determinazione dei coefficienti di Einstein nei coloranti del gruppo delle cianine.</i></p>
--	---

	<p>3.4 Principio di Franck-Condon; la luminescenza e i processi radiativi; la fluorescenza; il 2-naftolo e il ciclo di Förster; Spettrofluorimetri.</p> <p><u>Esperienza di laboratorio:</u> Determinazione delle costanti di acidità del 2-naftolo nello stato elettronico fondamentale e in quello eccitato; spettri di assorbimento e spettri di eccitazione.</p> <p><u>Esperienza di laboratorio:</u> Per registrare gli spettri Raman dell'acqua e della fluoresceina utilizziamo uno spettrofluorimetro. Le bande Stokes e anti-Stokes. Il gruppo puntuale dell'acqua e le transizioni vibrazionali associate.</p>
Testi di riferimento	<p>1) P.W. Atkins, de Paula, <i>Chimica Fisica</i>, Zanichelli</p> <p>2) John M. Brown, <i>Molecular spectroscopy</i>, Oxford Science Publications</p> <p>3) P.W. Atkins, R.S. Friedman, <i>Meccanica quantistica molecolare</i>, Zanichelli.</p> <p>4) B.C. Smith, <i>Fundamentals of Fourier Transform Infrared Spectroscopy</i>, CRC Press</p>
Note ai testi di riferimento	<p>Il "Atkins e Friedman" è necessario per la comprensione della spettroscopia, alcuni Capitoli del "Atkins, de Paula" per le nozioni di base, mentre il testo di "Smith" dedicato alla spettroscopia IR. Il "Brown" non è necessario, ma consente di avere una breve e completa visione della spettroscopia.</p>
Materiali didattici	<p>Sono disponibili come supporto i PowerPoint delle lezioni e le istruzioni per le esperienze di laboratorio sulla pagina internet del docente https://www.uniba.it/it/docenti/gentile-luigi/attivita-didattica</p>

Valutazione	
Modalità di verifica dell'apprendimento	<p><i>L'apprendimento viene verificato in base alla partecipazione alle esperienze ed esercitazioni, alla valutazione dei report consegnati (e corrispondenti note di laboratorio) e in base ad un esame orale. Quest'ultimo viene svolto contestualmente all'insegnamento di Chimica Fisica II.</i></p>
Criteri di valutazione	<ul style="list-style-type: none"> • Conoscenza e capacità di comprensione: <ul style="list-style-type: none"> ○ Abilità di discutere propriamente durante l'esame orale gli argomenti affrontati durante il corso • Conoscenza e capacità di comprensione applicate: <ul style="list-style-type: none"> ○ Correttezza delle relazioni di laboratorio • Autonomia di giudizio: <ul style="list-style-type: none"> ○ Capacità di gestirsi in laboratorio • Abilità comunicative: <ul style="list-style-type: none"> ○ Uso dei mezzi multimediali. ○ Esposizione sicura, sintetica ed efficace. ○ Organizzazione dei contenuti. ○ Lettura, interpretazione e costruzione grafici scientifici • Capacità di apprendere: <ul style="list-style-type: none"> ○ Individuazione dei punti nodali dell'argomento. ○ Capacità di collegamento tra argomenti. <p>Motivazione delle scelte e/o delle procedure adottate.</p>

<p>Criteri di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale</p>	<p><i>Oltre all'accertamento dell'acquisizione delle nozioni sperimentali e teoriche, verrà valutata la capacità di integrare le nozioni ottenute con altre discipline. Il voto finale è attribuito in trentesimi. Per ottenere una valutazione da:</i></p> <p><i>18 a 24 lo studente dovrà possedere le conoscenze di base della cinetica chimica e della spettroscopia e dimostrare di aver compreso il senso delle esperienze di laboratorio;</i></p> <p><i>24 a 27 lo studente dovrà essere in grado di analizzare i dati dell'esperienze e commentare in modo critico i dati sperimentali;</i></p> <p><i>27 a 30 lo studente dimostra un'ottima conoscenze delle tecniche spettroscopiche e della cinetica chimica oltre, possedere capacità critiche di analisi dei dati e un'adeguata capacità di esposizione.</i></p> <p><i>La lode è assegnata a coloro che abbiano consegnato relazioni senza errori materiali e propriamente discusse oltre ad aver risposto propriamente a tutte le domande dell'esame congiunto di Chimica Fisica.</i></p>
<p>Altro</p>	<p>.</p>
<p>.</p>	<p>.</p>

COURSE OF STUDY: Bachelor's degree in Chemical Science – L27

ACADEMIC YEAR: 2023/2024

ACADEMIC SUBJECT: Physical Chemistry II Laboratory

General information	
Year of the course	II year
Academic calendar (starting and ending date)	II semester (March-June)
Credits (CFU/ETCS):	4
SSD	CHIM/02 (Physical Chemistry)
Language	Italian
Mode of attendance	Mandatory attendance

Professor/ Lecturer	
Name and Surname	Luigi Gentile
E-mail	luigi.gentile@uniba.it
Telephone	+39 0805442033
Department and address	<i>Dipartimento di Chimica, Università di Bari, Via Edoardo Orabona, 4, Bari</i>
Virtual room	<i>Microsoft Teams</i>
Office Hours (and modalities: e.g., by appointment, on line, etc.)	Please send an email to settle a meeting (generally Tuesday and Wednesday afternoon)

Work schedule			
Hours			
Total	Lectures	Hands-on (laboratory, workshops, working groups, seminars, field trips)	Out-of-class study hours/ Self-study hours
100	16	30	54
CFU/ETCS			
4	2	2	

Learning Objectives	1. Knowledge and Understanding: The aim of the course is to provide the fundamentals for understanding atomic and molecular structure and their interaction with electromagnetic radiation.
	2. Ability to Apply Knowledge and Understanding: At the end of the course, the student will be able to: (i) become familiar with some spectroscopic techniques (UV-visible absorption; Fluorescence; FT-IR: polarimetry); (ii) Interpret spectroscopic data and use them to derive molecular parameters.
Course prerequisites	Basic Knowledge of Physical Chemistry: Kinetics and Thermodynamics

Teaching strategie	Lecture Sessions: Explanation of key concepts through traditional frontal lectures, using diagrams, graphs, and visual models to clarify abstract concepts.
	Laboratory Activities: Laboratory experiments demonstrating the principles of physical chemistry (spectroscopy and kinetics) in practice. This will allow students to see concepts in action and gain practical experience.
	Group Discussions: Engaging students in small group discussions about laboratory experiences to encourage collaboration and stimulate critical thinking.
	Individual Study: Assigning laboratory report writing tasks that allow students to delve into specific teaching topics.

	<p>Problem-Solving: Providing examples of problems and encouraging students to solve them by applying the learned concepts. Lecture slides with rich examples will be provided. This will enhance their problem-solving skills and practical understanding of the theory.</p>
Expected learning outcomes in terms of	
Knowledge and understanding on:	<p>Students will acquire in-depth knowledge of the theories and principles of</p> <ul style="list-style-type: none"> o Chemical kinetics, o Polarimetry, o Spectroscopy, <p>Understanding the underlying basic theoretical concepts related to chemical reactions and spectroscopic transitions. They will be able to understand and explain the molecular phenomena involved in reactions and interactions with electromagnetic radiation.</p>
Applying knowledge and understanding on:	<p>Students will apply acquired knowledge to conduct complex laboratory experiments, using techniques such as the</p> <ul style="list-style-type: none"> o Chemical clock method, o Polarimetry, o Various spectroscopic techniques (UV-Vis, IR, and fluorescence). <p>They will be able to interpret experimental data, analyze spectra, and understand the practical implications of studied chemical reactions and molecular interactions.</p> <ul style="list-style-type: none"> o Experimental Skills: Students will develop practical skills in conducting laboratory experiments, gaining proficiency in using scientific instruments (UV-Vis, IR, Spectrofluorimeter) and interpreting experimental results. o Analytical Skills: Students will be able to analyze complex data resulting from experiments, applying mathematical principles and theoretical concepts (kinetics and spectroscopy) to interpret spectra and understand molecular behaviors.
Soft skills	<p>Critical and Judgmental Abilities</p> <ul style="list-style-type: none"> o Problem-Solving Skills: Students will address theoretical and practical problems related to chemical reactions and spectroscopic transitions, applying their knowledge to solve complex scientific challenges. <p>Communication Skills</p> <ul style="list-style-type: none"> o Communication Competence: Students will learn to communicate the results of their research clearly and coherently through laboratory reports and discussions, developing scientific communication skills. <p>Self-Directed Learning Skills</p> <p>At the end of the course, the student will be able to</p> <ul style="list-style-type: none"> o Determine kinetic laws through experimental approaches. o Use spectroscopic techniques to obtain information about the chemical nature of substances, derive molecular parameters from spectroscopic techniques, and understand atomic and molecular transitions. o Report and analyze data in a report.
Syllabus	
Content knowledge	<p>1.0 Chemical Kinetics Elements Reaction rate and order of reaction; method of isolating one of the reactants, initial velocity method, and integration method of kinetic equation. Reactions of zeroth, first, and second order; determination of reaction order; dependence of rate on temperature. <i>Laboratory Experience:</i> Kinetic study of reactions using the chemical clock method: iodide-hydrogen peroxide reaction in acidic environment.</p> <p>2.0 Polarimetry Circular and elliptical polarization of electromagnetic radiation; ordinary and extraordinary rays; optical rotation. Kinetic study through polarimetry: measurement of optical rotation with a polarimeter; sucrose hydrolysis reaction in acidic environment. <i>Laboratory Experience:</i> Sucrose hydrolysis reaction.</p>

	<p>3.0 Introduction to Spectroscopy Electromagnetic radiation and its interaction with matter; Schrödinger's differential equation; Born-Oppenheimer approximation; molecular energy levels; intensity of a spectroscopic transition; Lambert-Beer law; transition probability; population of energy levels (Boltzmann distribution).</p> <p>3.1 Rotational Spectroscopy of Diatomic Molecules Classical and quantum mechanics recall; spectroscopic term; population of rotational levels; rotational transitions; rigid rotor model; selection rules; elastic rotor model.</p> <p>3.2 Roto-Vibrational Spectroscopy of Diatomic Molecules Harmonic oscillator model (classical and quantum description); anharmonic molecular vibrations; determination of anharmonicity constant; breakdown of Born-Oppenheimer approximation; hints of Raman spectroscopy; Infrared spectrometer; Michelson interferometer. <i>Laboratory Experience:</i> Roto-vibrational spectrum of HCl and CO. Recording the IR spectrum of a gaseous sample using FT-IR spectrophotometer. Interpretation of roto-vibrational spectrum. Effects of centrifugal stretching, anharmonicity, vibro-rotational coupling. Morse potential. Overtones. Rotational structure of the fundamental transition: R branch and P branch.</p> <p>3.3 UV-Vis Spectroscopy Orbital approximation; spectroscopic terms; selection rules; LUMO and HOMO; polyatomic molecules and electronic transitions; effects of functional groups and solvents on electronic spectra; electron in the box; dienes and cyanines; UV-Vis spectrophotometer. <i>Laboratory Experience:</i> Electronic spectra of substances with conjugated double bonds; determination of C-C bond length in compounds with conjugated double bonds; cyanine dye group and derivatives of butadiene. Determination of Einstein coefficients in cyanine dye group.</p> <p>3.4 Franck-Condon Principle; Luminescence and Radiative Processes; Fluorescence; 2-Naphthol and Förster Cycle; Fluorometers. <i>Laboratory Experience:</i> Determination of acidity constants of 2-naphthol in the ground and excited states; absorption spectra and excitation spectra. <i>Laboratory Experience:</i> To record the Raman spectra of water and fluorescein, we use a fluorometer. Stokes and anti-Stokes bands. The point group of water and associated vibrational transitions.</p>
Texts and readings	<p>1) <i>P.W. Atkins, de Paula, Chimica Fisica, Zanichelli</i> 2) <i>John M. Brown, Molecular spectroscopy, Oxford Science Publications</i> 3) <i>P.W. Atkins, R.S. Friedman, Meccanica quantistica molecolare, Zanichelli.</i> 4) <i>B.C. Smith, Fundamentals of Fourier Transform Infrared Spectroscopy, CRC Press</i></p>
Notes, additional materials	The "Atkins and Friedman" book is necessary for understanding spectroscopy, covering some chapters of "Atkins, de Paula" for the basics, and the "Smith" text dedicated to IR spectroscopy. The "Brown" book is not necessary, but it provides a brief and comprehensive overview of spectroscopy.
Repository	Lecture PowerPoint slides and laboratory experiment instructions are available as support on the professor's website at the following link: https://www.uniba.it/it/docenti/gentile-luigi/attivita-didattica

Assessment	
Assessment methods	Learning is assessed based on participation in experiments and exercises, evaluation of submitted reports (and corresponding lab notes), and an oral examination. The oral examination takes place concurrently with the Physical Chemistry II course.
Assessment criteria	<ul style="list-style-type: none"> • Knowledge and Understanding: <ul style="list-style-type: none"> ○ Ability to discuss the topics covered during the course properly in the oral exam. • Applied Knowledge and Understanding: <ul style="list-style-type: none"> ○ Accuracy of laboratory reports. • Autonomy of Judgment: <ul style="list-style-type: none"> ○ Ability to manage oneself in the laboratory. • Communication Skills: <ul style="list-style-type: none"> ○ Use of multimedia tools. ○ Confident, concise, and effective presentation. ○ Content organization. ○ Reading, interpreting, and creating scientific graphs. • Learning Skills: <ul style="list-style-type: none"> ○ Identification of key points in the topic. ○ Ability to establish connections between topics. ○ Explanation of the choices and/or procedures adopted.
Final exam and grading criteria	<p>In addition to assessing the acquisition of experimental and theoretical knowledge, the ability to integrate the acquired knowledge with other disciplines will be evaluated.</p> <p>The final grade is given out of thirty. To obtain a grade of:</p> <p>18 to 24, the student must have basic knowledge of chemical kinetics and spectroscopy and demonstrate understanding of the purpose of laboratory experiments. 24 to 27, the student must be able to analyze experimental data and critically comment on the results.</p>

	27 to 30, the student demonstrates excellent knowledge of spectroscopic techniques and chemical kinetics, along with critical analysis skills and effective presentation abilities. The highest honors (lode) are awarded to those who have submitted error-free and properly discussed reports, and have answered all questions during the joint exam of Physical Chemistry accurately.
Further information	
	.