

Chimica Fisica e Laboratorio

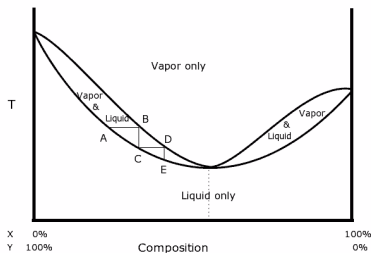
Giovanni Granucci

Secondo semestre, 6 CFU

Termodinamica

Energia interna U e funzioni ausiliarie H , A e G .

Potenziale chimico $\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{equilibrio chimico} \\ \text{equilibrio di fase} \end{array} \right.$



$$\mu_J = \mu_J^\circ + RT \ln a_J$$

a_J = attività del componente J

$$K_{eq} = \prod_J (a_J)^{\nu_J}$$

$$\Delta G_r^\circ = -RT \ln K_{eq}$$

Spettroscopia: stati molecolari

- Separazione dei moti
- Approssimazione di Born-Oppenheimer
- Accoppiamenti nonadiabatici
- Simmetria molecolare

acqua



C_{2v}

ammoniaca



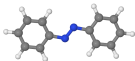
C_{3v}

CO₂



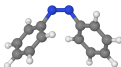
$D_{\infty h}$

trans-azobenzene



C_{2h}

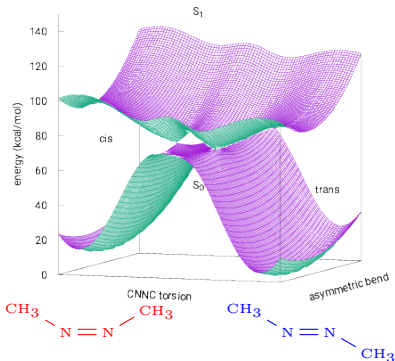
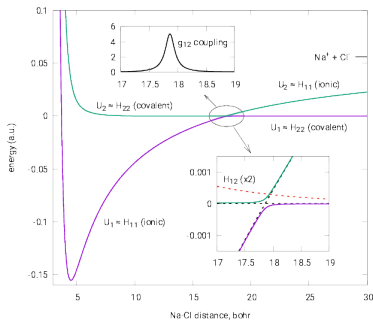
cis-azobenzene



C_2

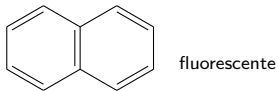
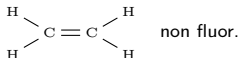
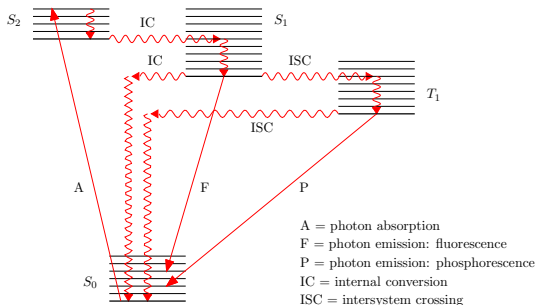
Spettroscopia UV-Vis: stati elettronici

- Caratterizzazione degli stati (multi)-elettronici in termini degli orbitali molecolari di frontiera
- Superfici di energia potenziale elettroniche
- Regioni di forte accoppiamento: incroci evitati
- Intersezioni coniche



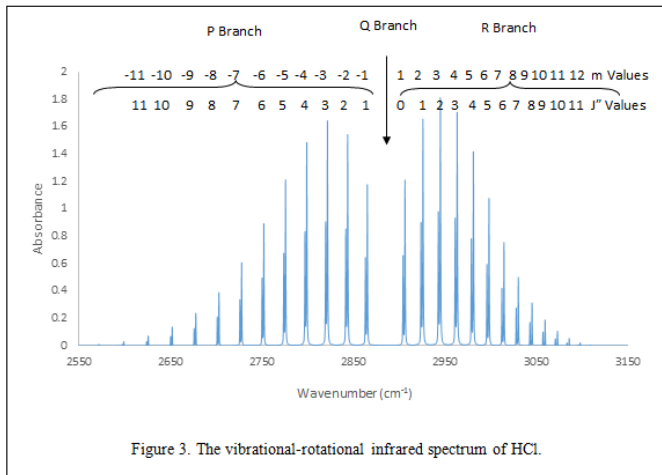
Spettroscopia UV-Vis

- Regole di selezione: approssimazione di Condon e fattori di Franck-Condon
- Canali di decadimento radiativi e non-radiativi
- Regola di Kasha (molecole organiche)



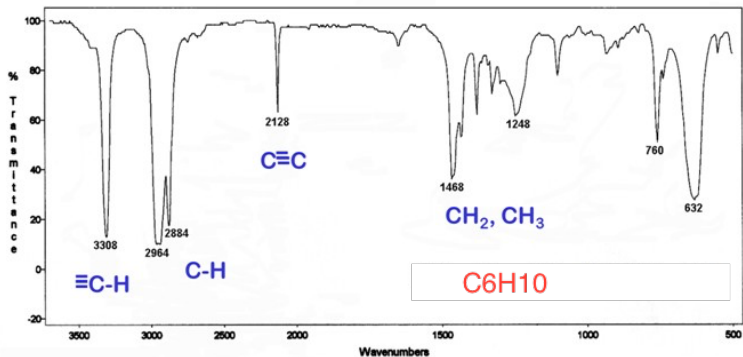
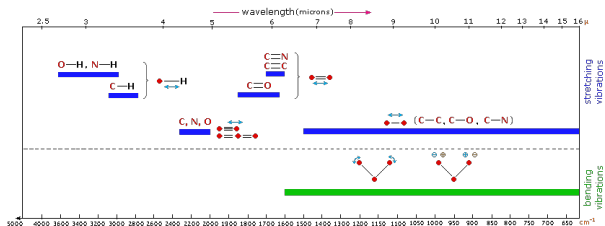
Spettroscopia IR

- Stati vibrazionali
- Regole di selezione



Spettroscopia IR

Identificazione composti organici



Laboratorio

Si svolgerà nei locali del Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale

- **Termodinamica:** entalpie di reazione e di evaporazione
- **Spettroscopia:** spettri IR e UV-Vis; molecole in fase gassosa e in soluzione