

Istruzioni per l'esame

Per l'esame orale, trovate su Moodle il materiale relativo agli esperimenti UV-vis ed ^1H -NMR fatti assieme.

Per il giorno dell'esame preparare:

- L'elaborazione dei risultati della determinazione del pKa del Verde di Bromocresolo
- La determinazione delle strutture delle molecole 1 – 5 e l'individuazione delle loro relazioni secondo lo schema indicato di seguito
- La risposta ad una delle domande a scelta

Per fare questo potete prepararvi una presentazione Power Point (o simile) oppure un discorso a braccio alla lavagna. Ovviamente, per la presentazione, potete usare le immagini delle lezioni ma SENZA le spiegazioni: quelle le voglio da voi per vedere se avete capito i concetti. Ovviamente, ci potrebbero delle domande a corollario delle vostre spiegazioni.

In caso di bisogno per chiarimenti e/o spiegazioni, fissiamo un appuntamento nel mio ufficio.

Buono studio!

Tiziano Montini

Preparazione per l'esame

Complementi di Chimica - a.a. 2016/2017

Esercizio 1

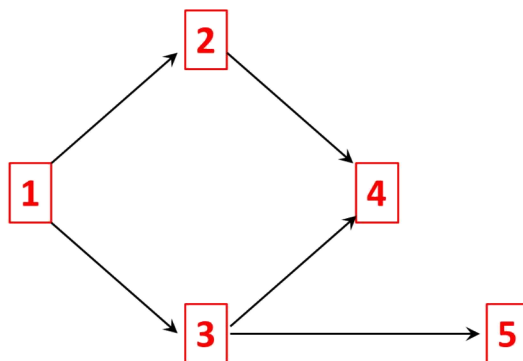
Il file Excel "VBC_170616.xlsx" riporta gli spettri del Verde di Bromocresolo (VBC) a diversi pH registrati nella regione del Visibile (400 – 800 nm) durante l'esercitazione in laboratorio. Le soluzioni di CH_3COOH ed NaOH avevano entrambe una concentrazione 0.100M. La soluzione dell'indicatore VBC è stata preparata sciogliendo 31.37mg di VBC in 30 mL di $\text{EtOH}/\text{H}_2\text{O}$ 30%. Le soluzioni di VBC a diversi pH sono state preparate mescolando 1.000mL della soluzione di CH_3COOH con volumi variabili della soluzione di NaOH (da 0.100 a 0.900 mL), aggiungendo 100 μL della soluzione di VBC e portando al volume di 10.0 mL con acqua distillata.

Tramite l'elaborazione dei dati a disposizione, determinare la pK_a del Verde di Bromocresolo.

Esercizio 2

Il file "Spettri 1-5.docx" riporta gli spettri $^1\text{H-NMR}$ registrati per 5 composti durante l'esercitazione di laboratorio, assieme alle loro formule molecolari e ai loro spettri IR. Sulla base di queste informazioni, individuare le formule di struttura dei composti 1 – 5 portando adeguate interpretazioni degli spettri a disposizione.

I composti 1 – 5 sono legati tra loro secondo lo schema di reazioni riportate nella figura successiva.



Alla luce di tali informazioni, individuare quali reazioni (catalizzate o non) possono venir impiegate nei vari step.

Domande a scelta

1. Tramite la teoria dell'orbitale molecolare, descrivere la molecola di CO e come si giustifica la sua posizione elevata nella serie spettroscopica.
2. La molecola 1 può essere sintetizzata tramite una reazione di condensazione aldolica. Individuare i reagenti necessari, quali possono essere i possibili sottoprodotti di tale reazione e descrivere il meccanismo della reazione.
3. Individuare i prodotti di reazione del composto 1 con (a) Br_2 e con (b) una miscela di HNO_3 e H_2SO_4 , descrivendo il meccanismo di reazione nei due casi.
4. Individuare i possibili prodotti di reazione del composto 4 a seguito di (a) una reazione di sostituzione $\text{S}_{\text{N}}1$ e di (b) una reazione di eliminazione E2, descrivendo il meccanismo di reazione nei due casi.
5. Il composto 3 può essere sintetizzato tramite una reazione di idroformilazione. Individuare i reagenti necessari, scrivere lo schema del processo catalitico ed descrivere le migliori condizioni di processo per l'ottenimento del prodotto carbonilico lineare.
6. Le fosfine come leganti in complessi metallici: descrivere la modalità di coordinazione e le proprietà elettroniche e di ingombro sterico, anche riportando esempi del loro effetto in catalisi omogenea.
7. La sintesi dell'ammoniaca come esempio di catalisi eterogenea: presentare i principi fondamentali che permettono di descrivere l'equazione cinetica del processo.
8. I materiali semiconduttori: descrizione delle proprietà elettroniche e di una possibile applicazione di tali materiali.