

## **ANALISI CHIMICA, ELABORAZIONE DATI E LABORATORIO**

### **Classe quinta [8 (8) ore]**

#### Parte generale

1. Il processo analitico come sequenza decisionale inserita in un approccio sistemico

1.1 Inquadramento del problema dal punto di vista non solo strettamente chimico (componenti maggioritari e minoritari del campione, distinguendo fra analita e matrice), ma anche merceologico, legislativo, ambientale, ecc.

1.2 Scelta della tecnica analitica ritenuta più adatta, in base a criteri di precisione, tempo, economicità, ecc.

1.3 Scelta del metodo di misura (curva di titolazione semplice o in derivata, curva di taratura, aggiunte, standard interno o esterno, ecc.).

1.4 Campionamento, trattamento ed eventuale attacco del campione.

1.5 Esecuzione dell'analisi.

1.6 Interpretazione ed elaborazione dei dati analitici, al fine di esprimere una valutazione sul campione in esame, anche in relazione , per quanto possibile, agli aspetti giuridici e normativi.

1.7 Presentazione dei risultati

2. Teoria della misura ed elaborazione dati

2.1 Richiami sulla teoria della misura. Errore assoluto e relativo; sistematico e casuale. Propagazione dell'errore.

2.2 Statistica applicata all'elaborazione dati. Distribuzioni di frequenza e probabilità. Le misure come variabili casuali. Espressione dei risultati e limiti di fiducia. Scarto dei risultati anomali. Confronto di medie e varianze. Interpretazione statistica dei parametri di valutazione delle misure: sensibilità, specificità, accuratezza, precisione ecc..

2.3 Analisi statistica bivariata. Correlazione. Regressione lineare e non lineare. Interpolazione. Metodo dei minimi quadrati. Applicazione alle curve di risposta strumentali. Cenni di analisi statistica multivariata.

2.4 Trattamento automatico dei dati. Il computer e il laboratorio chimico. Interfacciamento alla strumentazione analitica. Software generale e speciale. Sistemi dedicati e a gestione totale. Esempi di programmazione per l'analisi chimica.

3. Problematica generale dell'analisi

3.1 Esame comparativo delle diverse tecniche (strumentali e non) a disposizione per l'analisi e criteri di scelta.

3.2 Confronto fra i possibili metodi di misura e criteri di scelta.

3.3 Campionamento: criteri principali.

3.4 Trattamento e/o attacco del campione: metodi principali

3.5 Correlazione fra diversi parametri analitici in vista della presentazione dei dati e dell'eventuale giudizio sul campione.

3.6 Problematiche delle analisi "on line" nei cicli produttivi e/o durante trattamenti tecnologici.

3.7 Approccio alle problematiche riguardanti la messa a punto di un metodo di analisi in funzione delle esigenze di una determinata applicazione analitica (validazione del metodo) : valutazione delle caratteristiche principali in termini di parametri analitici quali accuratezza, limite di rivelabilità, sensibilità, riproducibilità, ecc.

3.8 Criteri di "qualità" nelle analisi e introduzione al concetto di "certificazione".

## **Parte speciale**

La trattazione di alcuni fra i seguenti temi:

1. analisi delle acque potabili e industriali
2. analisi dei metalli e delle leghe
3. analisi dei combustibili e dei lubrificanti
4. analisi bromatologiche (bevande alcoliche, zuccheri, oli e grassi, ecc.)
5. analisi collegate agli inquinamenti ambientali e alle problematiche dei rifiuti.

Altri argomenti potranno essere scelti in funzione delle esigenze locali.

## **Laboratorio**

Le esercitazioni relative alla parte introduttiva generale hanno come substrato la conoscenza della analisi classica e strumentale già acquisita negli anni precedenti e si propongono come obiettivo principale l'applicazione dei metodi statistici all'elaborazione dei dati analitici. I numerosi dati disponibili vengono utilizzati per il calcolo di medie, varianze, limiti fiduciali; si costruiranno istogrammi e curve di distribuzione; si studierà la correlazione dei dati; si tratteranno rette di regressione e interpolanti; si farà uso dei test statistici per lo scarto di valori anomali e per il confronto fra procedure analitiche e/o strumenti.

Il software necessario, disponibile sul mercato, in qualche semplicissimo caso può essere integrato con altro redatto con la partecipazione degli studenti.

Le esercitazioni relative alla parte speciale si possono distinguere nei seguenti tipi:

- esecuzione di analisi su campioni certificati, eventualmente anche a livello individuale. Queste esercitazioni consentono, tra l'altro, di valutare meglio di altre i risultati ottenuti dagli allievi;
- esecuzione di analisi su campioni naturali e industriali, che presentino particolare interesse dal punto di vista analitico, merceologico ecc.;
- studio statistico delle interferenze da elementi estranei e dell'influenza di determinati parametri strumentali nella determinazione di sostanze in matrici più o meno complesse;
- studio comparativo di metodiche e relativa elaborazione statistica dei risultati, allo scopo di quantificare i parametri che ne determinano l'affidabilità.