

# ESERCIZI – NIR

## A SPUNTI DI RIFLESSIONE

1. Perché nella regione del NIR si osservano spettri molto complessi e relativamente poco intensi?

.....  
.....  
.....

2. Cosa si intende per *transflettanza*?

.....  
.....  
.....

3. Qual è la differenza sostanziale fra un'analisi qualitativa «di ricerca» e una «di riconoscimento»?

.....  
.....  
.....

4. Cosa si intende per *cluster analysis*?

.....  
.....  
.....

5. Cos'è la calibrazione multivariata?

.....  
.....  
.....

6. A cosa serve  $R^2$ ?

.....  
.....  
.....

7. Spiegare se la granulometria di un campione può influenzare lo spettro NIR e, in caso positivo, se questo inconveniente può essere sfruttato sotto il profilo analitico.

.....  
.....  
.....

8. Stabilire un confronto fra Spettrofotometria MIR e NIR.

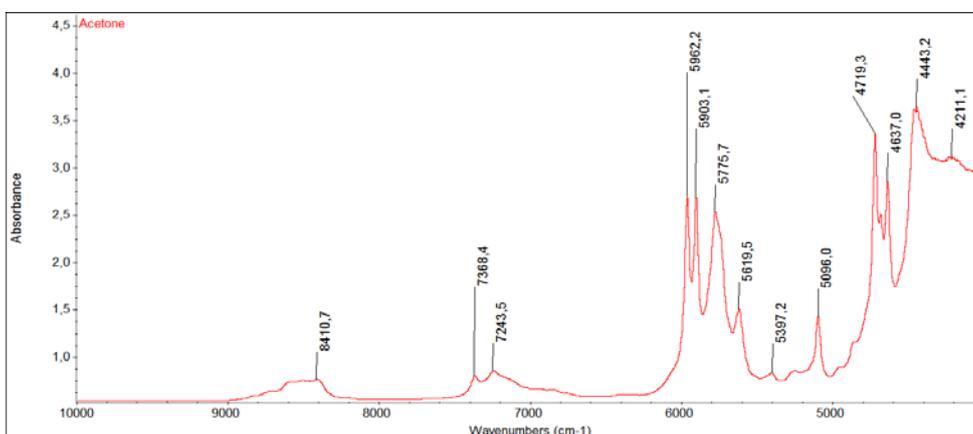
.....  
.....  
.....

## B PROBLEMI NUMERICI

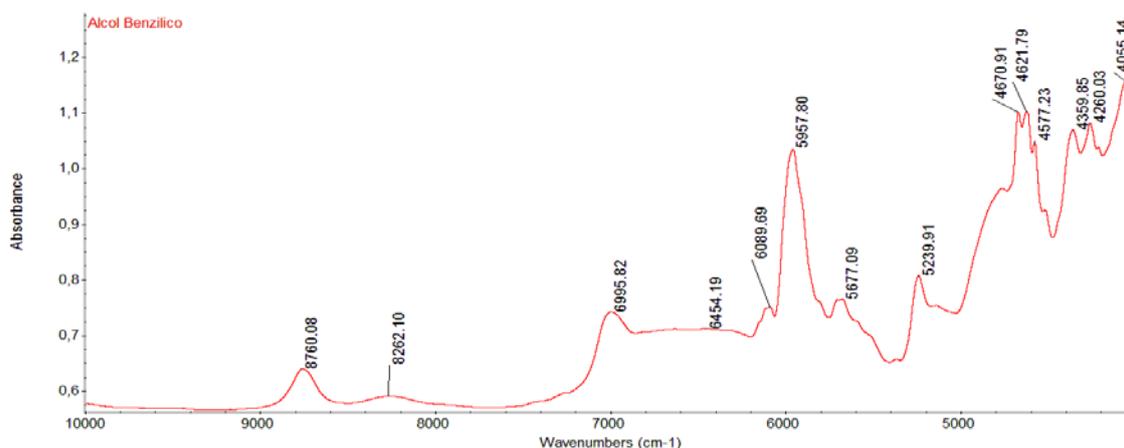
### Premessa

- Non vengono riportati problemi numerici relativi all'analisi quantitativa in quanto nella pratica richiedono sempre l'uso di software chemiometrici.
- Dalla consultazione delle diverse tabelle relative all'assorbimento NIR (incluse contraddizioni più o meno trascurabili fra le varie fonti) nasce subito l'impressione netta della difficoltà di operare come nel Medio IR, ovvero di assegnare le varie bande (quantomeno quelle principali) a determinati legami chimici. Sono invece evidenti le sovrapposizioni fra bande di assorbimento, fenomeno che sta appunto alla base dell'impossibilità di utilizzare il NIR in analisi qualitativa «di ricerca». Anche il procedimento più semplice, ovvero quello di assegnare le diverse bande conoscendo la formula di struttura del campione, non appare sempre agevole. In questa sede si invita comunque a effettuare con impegno un ragionevole tentativo, senza per questo accanirsi eccessivamente sui piccoli dettagli.

1. Attribuire le bande principali dello spettro NIR dell'acetone, sulla base della tabella generale proposta nel capitolo e delle molto più dettagliate tabelle di assorbimento NIR allegate.

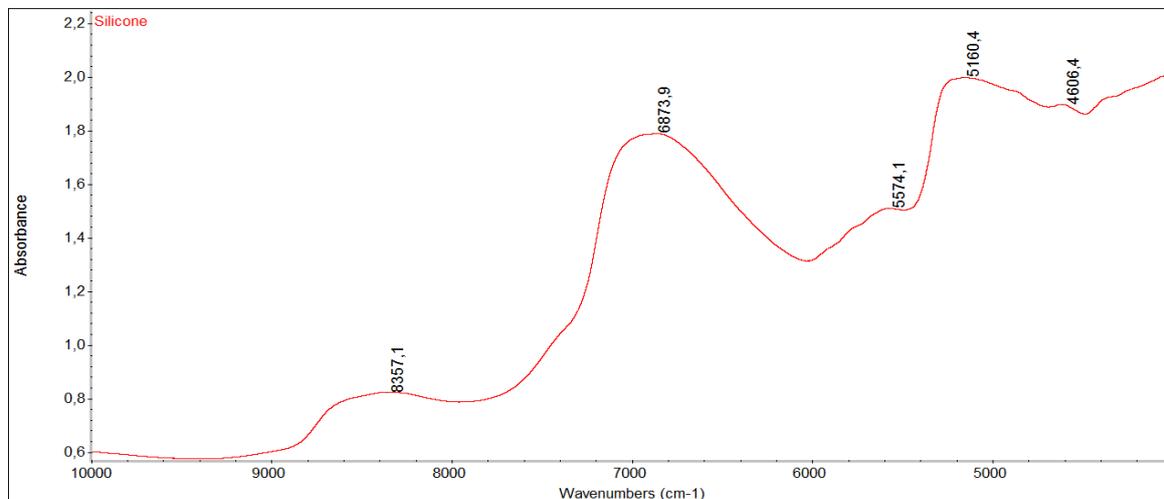


2. Attribuire, per quanto possibile, le bande principali dello spettro NIR dell'alcol benzilico.

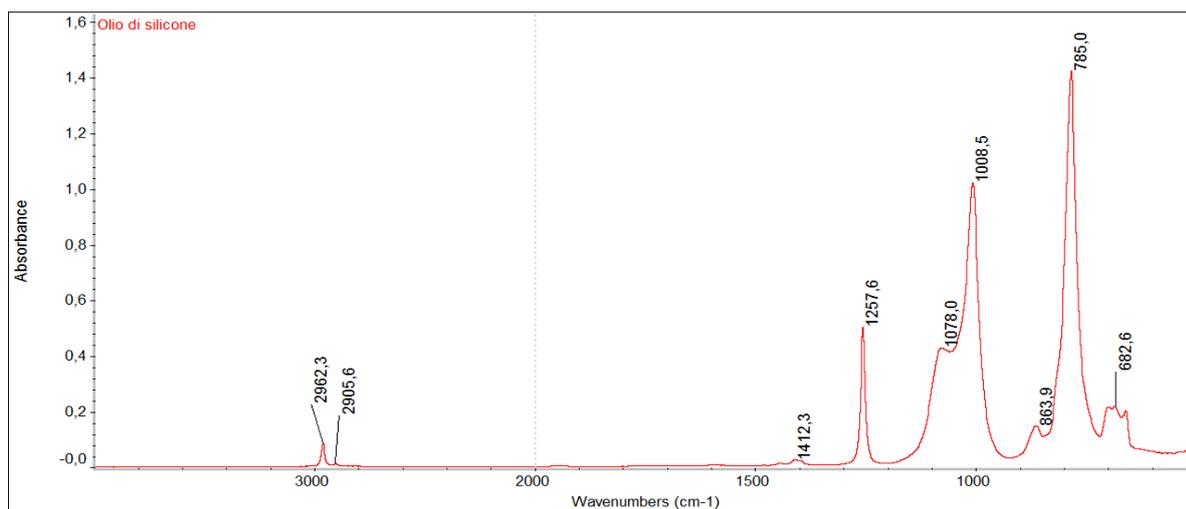


3. Attribuire le bande principali dello spettro NIR del silicone, confrontandolo anche con lo spettro nel MIR. Quale delle due regioni spettrali fornisce migliori informazioni?

### NIR



### MIR



.....

.....

.....

.....

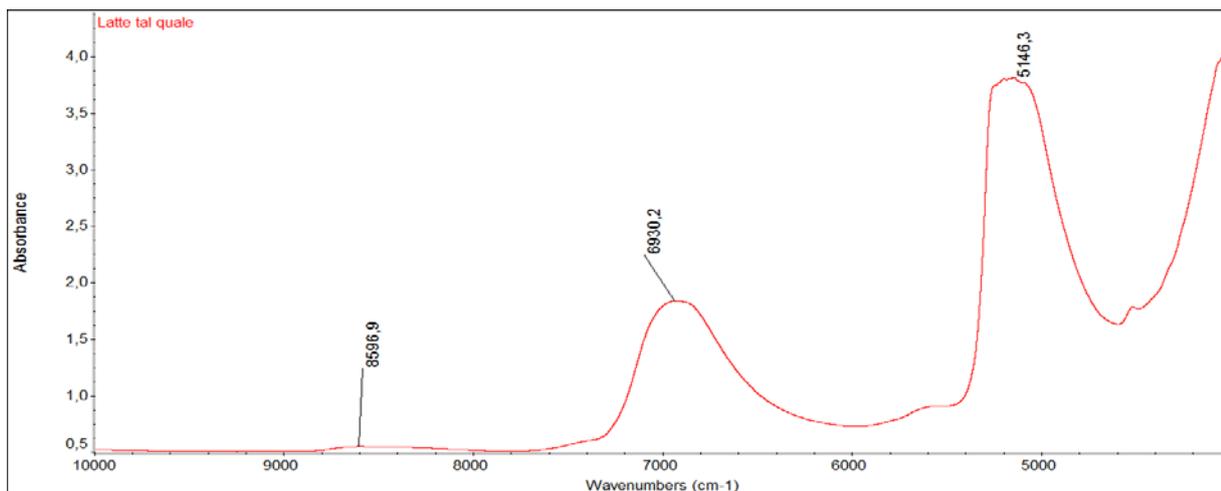
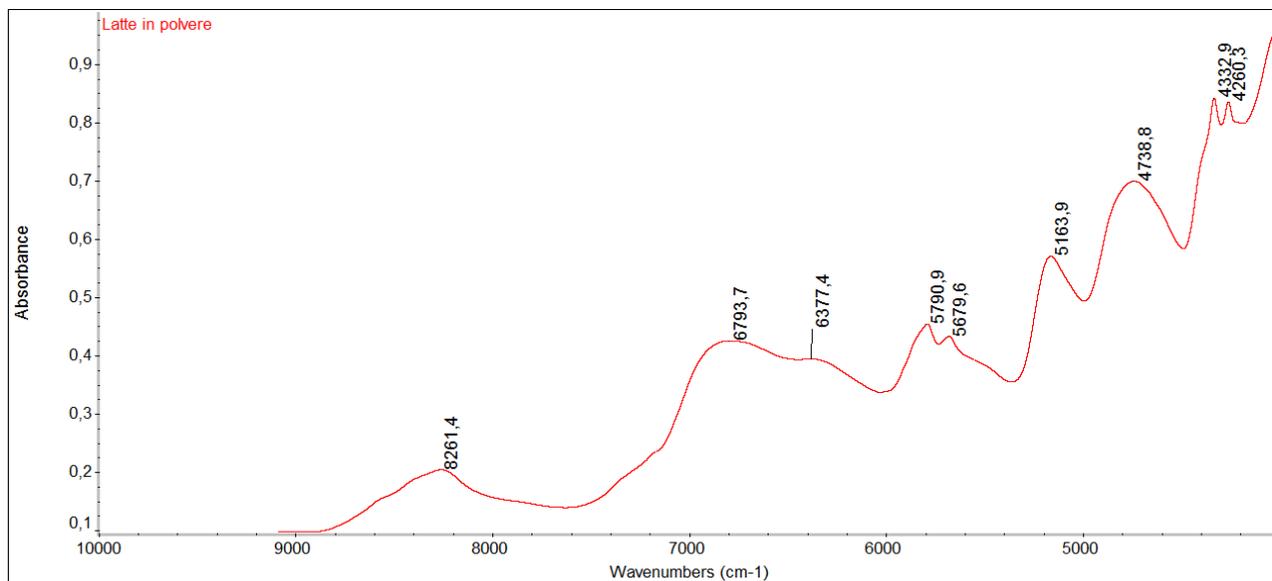
.....

.....

.....

.....

4. Nelle figure che seguono sono riportati gli spettri NIR del latte in polvere e del latte tal quale. Attribuire le bande principali e valutare di conseguenza le potenzialità delle diverse tipologie di campionamento sotto il profilo dell'analisi qualitativa.



.....

.....

.....

.....

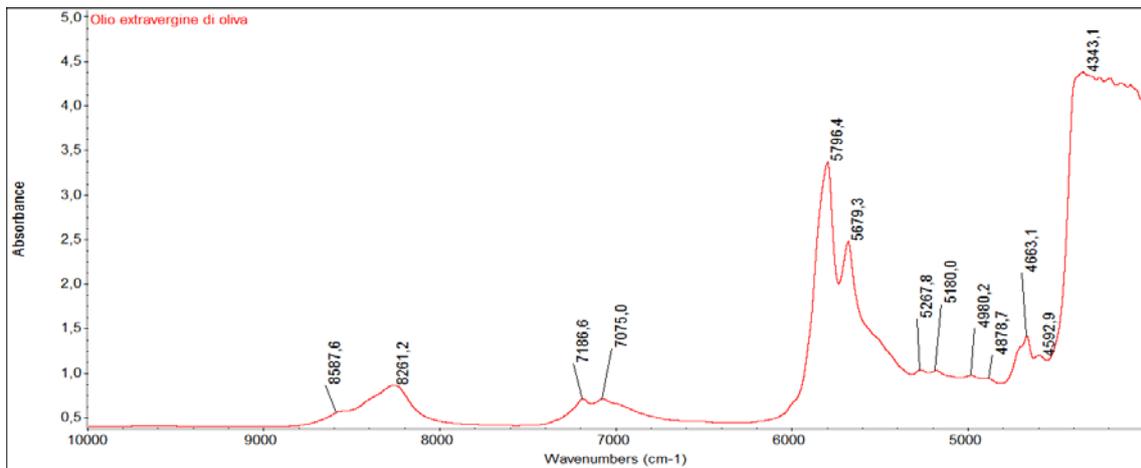
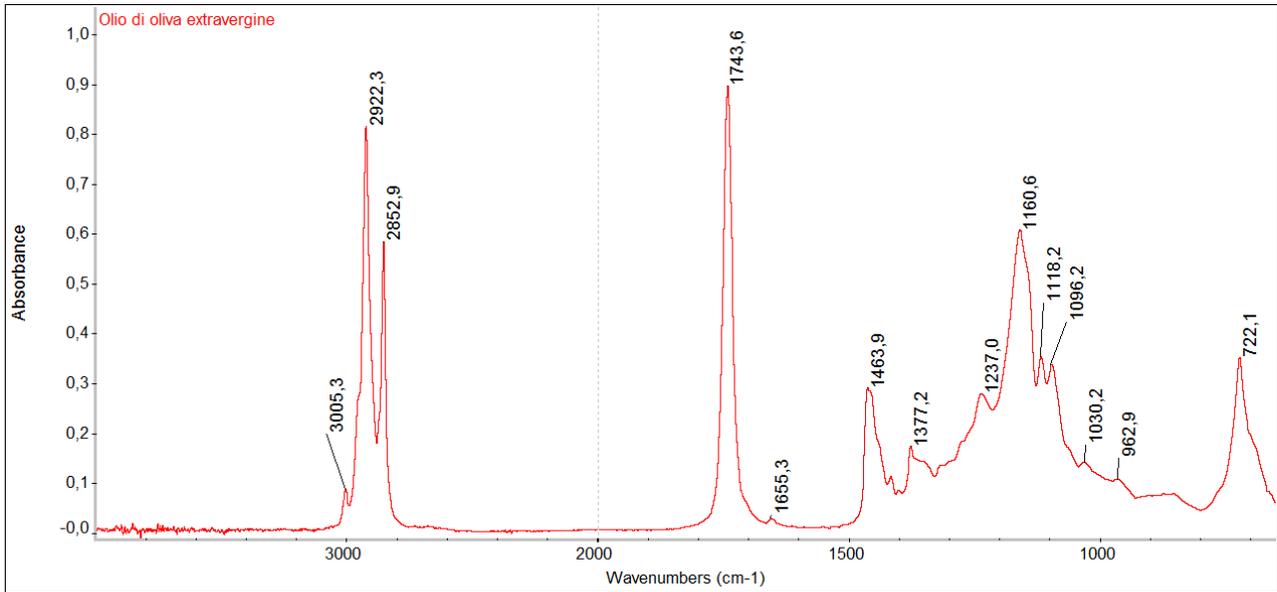
.....

.....

.....

.....

5. Nelle figure che seguono sono riportati gli spettri FT-IR e NIR di un olio d'oliva extravergine. Attribuire le bande principali e valutare di conseguenza le potenzialità delle due tecniche sotto il profilo dell'analisi qualitativa.



.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....