

# CHIMICA FISICA DEI MATERIALI CON LABORATORIO – Mod. A

Docente: Giuseppe Colafemmina, [giuseppe.colafemmina@uniba.it](mailto:giuseppe.colafemmina@uniba.it)

ricevimento: Lun, Mar, Merc, Gio e Ven dalle 15:00 alle 17:00

Anno di Corso e Semestre: 3°A, 1°S

CFU: 4Lez e 2 Lab = 6 CFU totali

## Obiettivi del Corso

Conoscenza della varie spettroscopie più comuni usate per la caratterizzazione dei materiali. Mostrare che la spettroscopia è la parte sperimentale di quello che hanno studiato nei primi due anni circa la struttura della materia. Applicazione delle tecniche spettroscopiche per analisi qualitative e quantitative dei materiali sotto indagine. Fornire indicazioni pratiche sull'uso della strumentazione da laboratorio.

## Programma

### Aspetti Generali

Cenni storici - Corpo nero e suo spettro. Leggi di Wien, Stefan-Boltzmann e Rayleigh-Jeans, Effetto fotoelettrico. Legge di Planck. Spettro elettromagnetico. Emissione e assorbimento di una radiazione, coefficienti di Einstein e loro calcolo tramite l'applicazione della teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo. Legge di Lambert-Beer e Momento di transizione dipolare. Dipendenza della larghezza di riga dai fenomeni fisici connessi.

Trasformata Fourier - Aspetti generali con esempi di calcolo di trasformate Fourier di alcune funzioni utili in spettroscopia; esempi di spettroscopie a Trasformata Fourier (NMR, IR)

**Principio di Born-Oppenheimer:** Separazione dei moti nucleari da quelli elettronici

**Spettroscopia Rotazionale** –Classificazione delle molecole in base ai momenti d'inerzia principali. Livelli energetici rotazionali, regole di selezione e degenerazione dei livelli; distorsione centrifuga e spettro di un rotatore lineare.

**Spettroscopia Vibrazionale** – Potenziale armonico e anarmonico di Morse. Livelli energetici del vibratore biatomico; costante di anarmonicità e regole di selezione; Spettri roto-vibrazionali e misura delle costanti rotazionale, distorsione centrifuga e vibrazionale. Misura delle lunghezze di legame. Molecole poliatomiche ; introduzione delle coordinate normali e esempi di spettri reali. Illustrazione a blocchi di spettrofotometri IR e FTIR nelle loro parti essenziali.

**Spettroscopia molecolare**– Metodo LCAO orbitali molecolari per le molecole biatomiche, orbitali HOMO-LUMO; transizioni vibroniche, progressioni e sequenze. Principio di Franck-Condon, Intensità di una banda e fattori Franck-Condon. Sorte degli stati eccitati: processi radiativi e aradiativi; fluorescenza e fosforescenza; Statiditripletto e di singoletto. Illustrazione a blocchi di spettrofotometri e spettrofluorimetri; funzionamento dei loro componenti.

### Spettroscopia NMR

Aspetti generali : Atomi, nuclei, momenti angolari, stati di spin, precessione e frequenza di Larmor. Modello vettoriale – Magnetizzazione di bulk, impulso rf, rotating frame, spettro, chemical shift

Fourier Trasform e data processing.

La strumentazione NMR.

Interazioni nucleari - chemical shift, dipole-dipole, accoppiamento scalare e quadrupolare

Cenni di rilassamento di spin rilassamento longitudinale, trasversale

Stato Solido: Aspetti generali - Tecniche essenziali: MAS , Cross Polarization e tecniche di disaccoppiamento.

### **Esperienze di Laboratorio**

- 1) Analisi degli spettri IR in fase gas di molecole biatomiche CO e HCl per la misura delle costanti roto-vibrazionali relativa alle due molecole in un potenziale anarmonico.
- 2) Analisi quantitativa di un campione incognito di bromo-benzene tramite retta di taratura,
- 3) Determinazione di lunghezze medie di legami coniugati in dieni e coloranti. Misura della transizione 0-0' tramite misure di fluorescenza.
- 4) Misura della costante acida del 2-naftolo nello stato fondamentale e in quello eccitato tramite misure di spettroscopia Uv-Vis e fluorescenza.

### **Modalità di valutazione**

La valutazione è fatta tramite due esoneri delle parti teoriche in itinere senza preavviso e infine la discussione dei reports delle esperienze fatte in laboratorio in cui si legano le conoscenze teoriche acquisite tramite gli esoneri con le pratiche sperimentali utilizzate in laboratorio. Il voto è la media delle differenti valutazioni incentivando il superamento dell'esame con +1 punto di velocità per i frequentanti in corso.

### **Materiale didattico**

SPECTRA OF ATOMS AND MOLECULES – P. F. Bernath 2<sup>nd</sup> ed. Oxford (2005)

MODERN SPECTROSCOPY- J. Michael Hollas 4<sup>th</sup> Ed. – Wiley (2004)

SOLID STATE NMR BASIC PRINCIPLES AND PRACTICE – D C Apperley, R K Harris, P Hodgkinson – Momentum Press (2012)

Slides delle lezioni