



Corso di Laurea in  
**SCIENZA E TECNOLOGIA  
DEI MATERIALI**

Triennale – L30

Principali informazioni sull'insegnamento	
Denominazione dell'insegnamento	<b>Chimica Fisica dei Materiali -Mod A</b>
Corso di studio	<i>Scienza e Tecnologia dei Materiali</i>
Anno di corso	<i>Terzo</i>
Crediti formativi universitari (CFU) / European Credit Transfer and Accumulation System (ECTS):	: 5 CFU
SSD	<i>CHIM 02</i>
Lingua di erogazione	<i>Italiana</i>
Periodo di erogazione	<i>I Semestre</i>
Obbligo di frequenza	<i>Fortemente consigliato</i>

Docente	
Nome e cognome	Giuseppe Colafemmina
Indirizzo mail	Giuseppe.colafemmina@uniba.it
Telefono	0805442040
Sede	<i>Dipartimento di Chimica</i>
Sede virtuale	<a href="https://teams.microsoft.com/l/channel/19%3a6be8865fd9348a8a46ec6c75eb39bb8%40thread.tacv2/Generale?groupId=fb033635-8153-42dc-819f-960acf7d2a7a&amp;tenantId=c6328dc3-afdf-40ce-846d-326eead86d49">https://teams.microsoft.com/l/channel/19%3a6be8865fd9348a8a46ec6c75eb39bb8%40thread.tacv2/Generale?groupId=fb033635-8153-42dc-819f-960acf7d2a7a&amp;tenantId=c6328dc3-afdf-40ce-846d-326eead86d49</a>
Ricevimento (giorni, orari e modalità)	Tutti i giorni dal lunedì al venerdì ore 15-18 oppure per mail o per telefono

Syllabus	
Obiettivi formativi	Acquisizione di conoscenze della struttura chimica dei materiali solidi, liquidi e gassosi tramite l'uso delle comuni tecniche spettroscopiche. Conoscenze di base degli aspetti teorici e strumentali alla base delle tecniche studiate
Prerequisiti	Conoscenze di Chimica Generale e Chimica-Fisica, Capacità di rappresentazione dei dati sperimentali
Contenuti di insegnamento (Programma)	<b>Aspetti Generali</b> Richiami storici e spettro elettromagnetico. Emissione e assorbimento di una radiazione, teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo. Legge di Lambert-Beer e Momento di transizione dipolare. Larghezza di riga. Trasformata Fourier - Aspetti generali con esempi di spettroscopie a Trasformata Fourier (NMR e IR). <b>Principio di Born-Oppenheimer:</b> Separazione dei moti nucleari da quelli elettronici <b>Spettroscopia Rotazionale</b> – Livelli energetici rotazionali, regole di selezione e degenerazione dei livelli; distorsione centrifuga e spettro di un rotatore lineare. <b>Spettroscopia Vibrazionale</b> – Spettri roto-vibrazionali, regole di selezione e misura delle costanti rotazionale, distorsione centrifuga e vibrazionale. Misura delle lunghezze di



	<p>legame. Molecole poliatomiche: introduzione delle coordinate normali</p> <p><b>Spettroscopia molecolare</b>– Metodo LCAO orbitali molecolari per le molecole biatomiche, transizioni vibroniche. Principio di Franck-Condon, Sorte degli stati eccitati. Stati di tripletto e di singoletto.</p> <p>Illustrazione a blocchi di spettrofotometri e spettrofluorimetri; funzionamento dei loro componenti.</p> <p><b>Spettroscopia NMR</b></p> <p>Aspetti generali, Modello vettoriale, Magnetizzazione di bulk, ottenimento di uno spettro, chemical shift. Fourier Trasform e data processing. Strumentazione NMR.</p> <p>Interazioni nucleari, chemical shift, dipole-dipole, accoppiamento scalare e quadrupolare</p> <p>Stato Solido NMR: Aspetti generali - Tecniche essenziali: MAS, Cross-Polarisation e tecniche di disaccoppiamento.</p> <p style="text-align: center;"><b>Esperienze di Laboratorio</b></p> <ol style="list-style-type: none"><li>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.</li><li>2) Analisi quantitativa di un campione incognito di bromobenzene tramite retta di taratura,</li><li>3) Determinazione di lunghezze medie di legami coniugati in dieni e coloranti. Misura della transizione 0-0' tramite misure di fluorescenza.</li></ol> <p>Misura della costante acida del 2-naftolo nello stato fondamentale e in quello eccitato tramite misure di spettroscopia Uv-Vis e fluorescenza.</p>
Testi di riferimento	<p>SPECTRA OF ATOMS AND MOLECULES P. F. Bernath 2<sup>nd</sup> ed. Oxford (2005)</p> <p>MODERN SPECTROSCOPY J. Michael Hollas 4<sup>th</sup> Ed. – Wiley (2004)</p> <p>SOLID STATE NMR BASIC PRINCIPLES AND PRACTICE – D C Apperley, R K Harris, P Hodgkinson – Momentum Press (2012)</p>
Note ai testi di riferimento	Solo alcuni capitoli e alcune sezioni relativi agli argomenti del programma svolto

Organizzazione della didattica			
Ore			
Totali	Didattica frontale	Pratica (laboratorio, campo, esercitazione, altro)	Studio individuale
125	24	30	71
CFU/ETCS			
5	3	2	



Corso di Laurea in  
**SCIENZA E TECNOLOGIA  
DEI MATERIALI**

Triennale – L30

Metodi didattici	
	Lezioni frontali con slides fornite agli studenti prima della lezione;; lavori di gruppo all'interno delle esperienze di laboratorio corredate di procedure da seguire; almeno due prove in itinere non concordate sul programma svolto.
Risultati di apprendimento previsti	
Conoscenza e capacità di comprensione	<ul style="list-style-type: none"><li>• <i>Conoscenza e capacità di comprensione</i> comprensione e conoscenza dei concetti di base della meccanica quantistica e della spettroscopia legati ai differenti tipi di materiali</li><li>• <i>Conoscenza e capacità di comprensione applicate</i> <i>Autonomia di giudizio</i></li><li>• <i>Abilità comunicative</i> - <i>Capacità di apprendere</i><ul style="list-style-type: none"><li>○ <i>Capacità di elaborare e presentare i dati sperimentali</i></li></ul></li></ul>
Conoscenza e capacità di comprensione applicate	capacità individuare le tecniche più efficaci nel caratterizzare il materiale sotto indagine, capacità di effettuare autonomamente semplici esperimenti e di elaborare i dati sperimentali di spettroscopia molecolare,
Competenze trasversali	<ul style="list-style-type: none"><li>• <i>Autonomia di giudizio</i> Corretta strategia da utilizzare in laboratorio per ottenere il risultato cercato utilizzando la strumentazione più appropriata presente in laboratorio.</li><li>• <i>Abilità comunicative</i> Proprietà di linguaggio nell'uso della lingua italiana scritta e orale sia nella presentazione dei risultati che nell'esposizione degli stessi; - abilità informatiche in rapporto alla elaborazione e presentazione di un semplice set di dati; - capacità di espressione nella presentazione e divulgazione delle proprie conoscenze con linguaggio scientifico appropriato; - capacità di lavorare in gruppo in modo da ottimizzare i tempi e ottenere un risultato efficace in laboratorio.</li><li>• <i>Capacità di apprendere in modo autonomo</i><ul style="list-style-type: none"><li>○ Stesura di relazioni circa le attività di laboratorio svolte. Presentazione dei dati sperimentali ottenuti</li></ul></li></ul>
Valutazione	
Modalità di verifica dell'apprendimento	Conoscenza dei principi alla base della spettroscopia; Conoscenza delle equazioni fondamentali che descrivono gli stati energetici e spettroscopici, le regole di selezioni in modo da interpretare i differenti spettri; Conoscenza della comune attrezzatura chimica di un laboratorio e utilizzo di procedure semplici in uso un laboratorio chimico;



Corso di Laurea in  
**SCIENZA E TECNOLOGIA  
DEI MATERIALI**

Triennale – L30

	Stima degli errori di una misura e rappresentare graficamente i dati sperimentali in maniera appropriata; saper scrivere un report di laboratorio; saper presentare in maniera efficace in forma scritta e orale i risultati di un esperimento.
Criteri di valutazione	<ul style="list-style-type: none"><li>○ Valutazione dei contenuti appresi</li><li>○ Valutazione dell'esposizione</li><li>○ Valutazione dei risultati ottenuti in laboratorio</li></ul>
Criteri di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale	Valutazione report di laboratorio (40%), Esame orale (60%), Incentivazione rapidità (+ 2/30); Esoneri senza preavviso durante il corso.
<b>Altro</b>	