

**INSEGNAMENTO/MODULO FONDAMENTI DI SPETTROSCOPIA**ANNO ACCADEMICO: **2019-2020**

TIPOLOGIA DI ATTIVITÀ FORMATIVA: attività caratterizzante

DOCENTE: **Angela De Bonis**e-mail: [angela.debonis@unibas.it](mailto:angela.debonis@unibas.it)sito web: [scienze.unibas.it/site/home.html](http://scienze.unibas.it/site/home.html).

telefono: 0971/206249

cell. 3472330740

Lingua di insegnamento: italiano

n. CFU: 6 (3di lezione e 3 di esercitazioni/laboratorio)	n. ore: 60 (di 24 lezione e 36 di esercitazione/laboratorio)	Sede: <b>Potenza</b> Dipartimento/Scuola: <b>Dipartimento di Scienze</b> CdS Chimica L 27	<b>Semestre: I</b> Dal 01 ottobre 2019 al 20 dicembre/20 gennaio 2020
---	---	--	---

**OBIETTIVI FORMATIVI E RISULTATI DI APPRENDIMENTO**

Il corso si propone di fornire le basi per una corretta interpretazione dell'interazione radiazione materia ed interpretazione degli spettri atomici e molecolari, applicando i principi della meccanica quantistica e della teoria dei gruppi all'interpretazione degli spettri atomici e molecolari. Lo studente dovrà mostrare di conoscere e saper utilizzare gli strumenti della meccanica classica, dell'ottica e della meccanica quantistica per ricavare dai dati spettroscopici le caratteristiche strutturali di molecole semplici. L'insegnamento contribuisce al raggiungimento dei seguenti risultati di apprendimento declinati secondo quanto indicato nei quadri A4.b.2 e A4.c della scheda SUA-CdS:

**Conoscenza e capacità di comprensione:**

- simmetria molecolare e teoria dei gruppi
- interazione tra la materia e le varie componenti dello spettro elettromagnetico
- spettroscopia rotazionale (microonde)
- spettroscopia vibrazionale (IR)
- spettroscopia Raman
- spettroscopia elettronica atomica e molecolare
- fluorescenza e fosforescenza
- elementi di base del funzionamento dei LASER

**Capacità di applicare conoscenza e comprensione: alla fine del corso lo studente dovrà essere in grado di**

- classificare le molecole nel gruppo puntuale di simmetria di appartenenza;
- identificare i moti molecolari attivi dal punto di vista spettroscopico;
- ricavare dagli spettri le caratteristiche dei sistemi molecolari analizzati (lunghezza di legame, angolo di legame, energia degli orbitali...).

**Abilità comunicative:**

Lo studente alla fine del corso deve essere in grado redigere una relazione scientifica e comunicare in forma orale in modo chiaro, ma scientificamente corretto dati, concetti o risultati scientifici legati all'analisi strutturale di molecole semplici.

**PREREQUISITI**

E' necessario aver assimilato le seguenti conoscenze fornite dai corsi di Matematica I, Matematica II, Fisica I,

---

Fisica II e Chimica Fisica

- utilizzo degli strumenti matematici
- elementi di elettromagnetismo
- elementi di ottica
- elementi di meccanica quantistica

---

CONTENUTI DEL CORSO

Simmetria molecolare e gruppi puntuali di simmetria (4ore)

- La simmetria molecolare: elementi ed operazioni.
- Gruppi puntuali di simmetria: classificazione degli oggetti.
- Applicazione della simmetria a problemi riguardanti i moti molecolari.
- Riduzione di rappresentazioni riducibili

Interazione radiazione-materia (3 ore + 1 ora di laboratorio)

- Condizioni di risonanza di Bohr.
- Coefficienti di Einstein per assorbimento, emissione stimolata e spontanea.
- Parametri strumentali degli spettrofotometri.

Spettroscopia rotazionale (3 ore + 2 ore di laboratorio)

- Approssimazione del rotatore rigido.
- Effetto della distorsione centrifuga.
- Spettroscopia rotazionale di molecole poliatomiche.
- Rotatori sferici, simmetrici e asimmetrici.
- L'effetto Stark

Spettroscopia vibrazionale IR (5 ore + 15 ore di laboratorio)

- Spettroscopia vibrazionale di molecole biatomiche.
- Approssimazione di armonicità elettrica e meccanica.
- Spettro rotovibrazionale di molecole biatomiche
- Dipendenza della costante rotazionale dall'energia vibrazionale
- Spettroscopia vibrazionale di molecole poliatomiche.
- Coordinate normali di vibrazione.
- Regole di selezione.
- Struttura fine rotazionale.
- Potenziali a più di un minimo.

Spettroscopia Raman (2ore + 4 ore di laboratorio)

- Spettroscopia Raman: modello quantistico e modello classico.
- Regola di mutua esclusione.
- Applicazioni della spettroscopia Raman in campo ambientale, farmacologico e dei beni culturali.

Spettroscopia atomica (2 ore + 4 ore di laboratorio)

- Spettroscopia elettronica atomica.
  - Struttura fine ed iperfine.
-

- 
- Termini e stati.

#### Spettroscopia Uv-Vis (3 ore + 10 ore di laboratorio)

- Spettroscopia elettronica di molecole biatomiche.
- Il principio di Frank-Condon.
- Diagramma di Jablonski

#### Effetto Laser (2 ore)

---

##### METODI DIDATTICI

Il corso prevede 60 ore di didattica frontale tra lezioni ed esercitazioni. In particolare sono previste 24 ore di lezione in aula e 36 ore di esercitazioni guidate in laboratorio.

---

##### MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

L'esame consiste nella preparazione delle relazioni di laboratorio, con elaborazione anche grafica dei risultati sperimentali, ed esame orale.

---

##### TESTI DI RIFERIMENTO E DI APPROFONDIMENTO, MATERIALE DIDATTICO ON-LINE

C.N. BANWELL, E. McCASH – Fundamental of Molecular Spectroscopy, McGraw Hill (1994)

J.M. HOLLAS, Modern Spectroscopy – Wiley (1987)

D.C. HARRIS, M.D. BERTOLUCCI – Symmetry and Spectroscopy – Dover (1989)

---

##### METODI E MODALITÀ DI GESTIONE DEI RAPPORTI CON GLI STUDENTI

All'inizio del corso, dopo aver presentato i contenuti, si raccoglie l'elenco degli studenti che intendono iscriversi al corso, corredato di nome, cognome, matricola ed email.

Durante il corso il docente mette a disposizione degli studenti il materiale didattico.

Orario di ricevimento: martedì e giovedì dalle 10.00 alle 12.00 presso il "Laboratorio di Chimica Fisica Laser".

Oltre all'orario di ricevimento settimanale, il docente è disponibile in ogni momento per un contatto con gli studenti, previo appuntamento stabilito telefonicamente o mediante posta elettronica.

---

##### DATE DI ESAME PREVISTE<sup>1</sup>

11/02/2020

10/03/2020

21/04/2020

19/05/2020

09/06/2020

15/07/2020

12/09/2020

20/10/2020

17/11/2020

15/12/2020

---

SEMINARI DI ESPERTI ESTERNI    SI     NO X

---

ALTRE INFORMAZIONI

---