

ANNO ACCADEMICO: **2016-2017**INSEGNAMENTO/MODULO: **FONDAMENTI di SPETTROSCOPIA**TIPOLOGIA DI ATTIVITÀ FORMATIVA: **Base**DOCENTE: **Prof. Angela De Bonis**e-mail: **angela.debonis@unibas.it**

sito web:

telefono: **0971205664**cell. di servizio: **3386043762**Lingua di insegnamento: **ITALIANO**n. CFU: **6****(3 di lezione e 3 di esercitazioni/laboratorio)**n. ore: **60****(24 di lezione e 36 di esercitazione/laboratorio)**Sede: **Potenza**Dipartimento/Scuola: **Dipartimento di Scienze**CdS: **CHIMICA(L27)**Semestre: **I**

(date previste di inizio e fine corso:

**03/10/2016,****15-31/01/2017)****OBIETTIVI FORMATIVI E RISULTATI DI APPRENDIMENTO**

Il corso si propone di fornire le basi per una corretta interpretazione dell'interazione radiazione materia, applicando i principi della meccanica quantistica e della teoria dei gruppi all'interpretazione degli spettri atomici e molecolari.

Le principali conoscenze fornite saranno:

- 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

Le principali abilità saranno:

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

**PREREQUISITI**

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

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

**CONTENUTI DEL CORSO**

Simmetria molecolare e gruppi puntuali di simmetria (4 ore)

- 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 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**

Relazioni di laboratorio 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.

---

---

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

15/02/2017

15/03/2017

12/04/2017

16/05/2017

13/06/2017

18/07/2017

19/09/2017

17/10/2017

19/12/2017

---

---

SEMINARI DI ESPERTI ESTERNI    SI     NO

---

---

ALTRE INFORMAZIONI

---

---

---

<sup>1</sup>Potrebbero subire variazioni: consultare la pagina web del docente o del Dipartimento/Scuola per eventuali aggiornamenti