



UNIVERSITÀ  
DEGLI STUDI  
FIRENZE

Scuola di  
Scienze Matematiche,  
Fisiche e Naturali

Corso di Laurea in Chimica  
Curriculum Scienze Chimiche  
Anno Accademico 2014/2015

## Determinazione spettroscopica delle energie di interazione in addotti molecolari modello

### Spectroscopic determination of the binding energy in model molecular complexes

Lo scopo di questo progetto di tesi è stato lo studio delle interazioni non-covalenti che hanno luogo in sistemi modello, quali i complessi di van der Waals. In particolare ci siamo occupati dei complessi formati, in fase gassosa, dall'anisolo con l'anidride carbonica. Molti complessi dell'anisolo sono già stati studiati mostrando strutture dominate da legami a ponte idrogeno, come nei complessi con acqua, o da interazioni dispersive che coinvolgono il sistema di elettroni  $\pi$ , complessi con ammoniaca, metanolo, dimero dell'anisolo. Studi precedenti hanno mostrato che nell'addotto 1:1 la  $\text{CO}_2$  giace sul piano dell'anello aromatico dell'anisolo; tale struttura risulta stabilizzata da interazioni elettrostatiche. Il nostro lavoro ha permesso di stabilire direttamente l'energia di legame dell'addotto in diversi stati elettronici. Inoltre è stato anche studiato per la prima volta l'addotto anisolo- $\text{CO}_2$  1:2, fornendo le prime indicazioni sulla sua struttura, sulla diversa energetica dei siti di legame coinvolti e sulla variazione di questa nei diversi stati elettronici.

Lo studio è stato condotto preparando questi sistemi attraverso la tecnica dei fasci molecolari e studiandoli per mezzo di spettroscopie laser di ionizzazione risonante. In particolare lo spettro elettronico dei diversi cluster è stato misurato con metodi di fotoionizzazione e rivelazione degli ioni, di interesse, attraverso uno spettrometro di massa. La misura dello spettro dei fotoelettroni emessi a seguito della ionizzazione ci ha fornito la misura del potenziale di ionizzazione dei diversi addotti. Questi dati, insieme alla determinazione della energia di dissociazione degli addotti nella superficie di potenziale ionica, ci ha permesso di determinare l'energetica del sistema nei diversi stati elettronici.

**Relatore:** Dr. Maurizio Becucci - maurizio.becucci@unifi.it

**Correlatore:** Dr. Giangaetano Pietraperzia - gianni.pietraperzia@unifi.it

**Candidato:** Lorenzo Tinacci - lorenzo.tinacci@stud.unifi.it