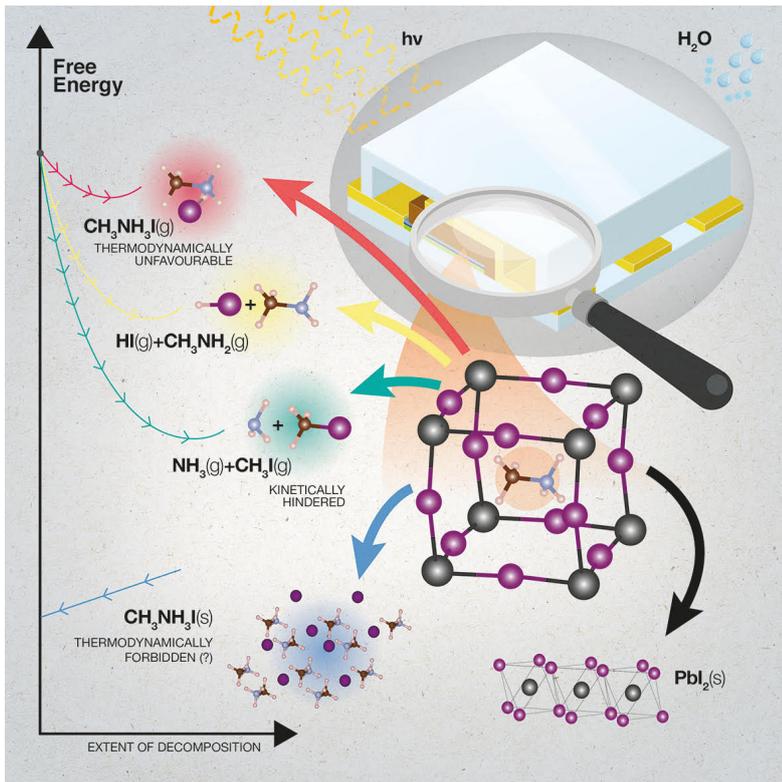


Spettrometria di massa con sorgente molecolare effusiva: dalle molecole di alta temperatura ai materiali *green*

Andrea Ciccioi, Dipartimento di Chimica, Sapienza - Università di Roma

Nella prima parte del seminario verranno richiamati i fondamenti e le origini della tecnica sperimentale basata sull'accoppiamento di una sorgente molecolare di Knudsen con uno spettrometro di massa (KEMS, *Knudsen Effusion Mass Spectrometry*), sottolineandone il legame con la nascita e lo sviluppo del settore della Chimica Fisica noto come "Chimica delle Alte Temperature". Successivamente, si illustrerà l'evoluzione del metodo e delle sue applicazioni chimico-fisiche negli ultimi decenni e negli anni più recenti, attraverso una breve rassegna di alcuni lavori rappresentativi del gruppo di ricerca in cui ha operato e opera il relatore. La varietà delle informazioni termodinamiche (e non solo) che si possono ottenere dal metodo verrà discussa dapprima con esempi tratti da ricerche sulla produzione ed identificazione di nuovi legami chimici (cioè legami presenti in specie biatomiche mai identificate in precedenza per via sperimentale), evidenziando anche l'intergioco tra caratterizzazione sperimentale e calcoli quantistici per queste nuove specie molecolari. In particolare, verranno presentati alcuni risultati riguardanti molecole contenenti atomi pesanti, nei quali gli effetti relativistici influenzano in modo significativo l'energia di dissociazione. Si passerà poi a discutere sinteticamente un altro settore di ricerca chimico-fisica nel quale la KEMS ha fornito e potrà fornire contributi importanti: lo studio della decomposizione termica e della vaporizzazione ad alta temperatura di materiali solidi di interesse tecnologico. Infine, verranno discussi con maggiore dettaglio alcuni lavori più recenti relativi all'applicazione della tecnica allo studio della stabilità termica, sia termodinamica che cinetica, di composti organici o ibridi che hanno attirato molto interesse negli ultimi 10-15 anni per le loro potenziali applicazioni nell'ambito delle tecnologie *green*, quali i liquidi ionici e le perovskiti ibride con anione alogenuro (vedi Figura). Gli esempi illustrati metteranno in evidenza come la KEMS, pur essendo una tecnica ormai classica, possa rivestire anche in futuro un ruolo rilevante non soltanto, come è stato tradizionalmente, nell'ambito della termodinamica chimico-fisica, ma anche nello studio di proprietà rilevanti ai fini della progettazione, della sintesi e dell'ottimizzazione delle condizioni di impiego di materiali innovativi.



Canali di decomposizione della perovskite ibrida triioduro di piombo e metilammonio, identificati mediante KEMS.