

STRUTTURISTICA CHIMICA

Laurea Specialistica in Fisica

A. A. 2007-08

Il corso, svolto in lingua italiana, prevede sia ore di lezioni teoriche che ore di esercitazioni in aula.

Prerequisiti: è consigliata una conoscenza base delle teorie del legame chimico

Obiettivi formativi: acquisire una buona conoscenza delle proprietà di simmetria delle molecole e fornire alcuni strumenti per la comprensione degli spettri molecolari Raman/IR mediante l'uso della teoria dei gruppi.

L'esame consiste nella presentazione e nella discussione di un elaborato che applicherà argomenti affrontati nel corso ad un caso specifico concordato con il docente.

Programma

Metodo VSEPR e geometria molecolare:

- Influenza delle concentrazioni di carica nel guscio di valenza sulla struttura geometrica delle molecole, domini delle concentrazioni di carica elettronica, deviazioni dagli angoli ideali di legame, effetto dell'elettronegatività del legante, legami multipli, legami a più centri, lunghezze dei legami, limiti del metodo VSEPR.

Teoria dei Gruppi:

- Elementi e operazioni di simmetria; Gruppi puntuali di simmetria; Identificazione del gruppo puntuale di simmetria di alcune molecole
- Tavola delle moltiplicazioni; Rappresentazioni riducibili ed irriducibili; Orto-normalità delle rappresentazioni; Costruzione della tavola dei caratteri per i gruppi C_{2v} e C_{3v} ; Rappresentazioni Degeneri; Riduzione di una rappresentazione nelle sue componenti irriducibili, Operatori di proiezione; Prodotto diretto delle rappresentazioni
- Applicazione della teoria dei Gruppi alla descrizione del legame chimico: semplificazione del determinante secolare e costruzione del diagramma energetico della molecola (molecole lineari e non lineari, molecole cicliche)
- Vibrazioni molecolari: rappresentazione totale del movimento degli atomi che compongono la molecola; rappresentazioni traslazionali, vibrazionali e rotazionali
- Applicazione della teoria dei Gruppi allo studio della spettroscopia vibrazionale: spettroscopia IR e spettroscopia Raman

Molecole biatomiche: equazione di Schrödinger, funzioni d'onda rotazionali e vibrazionali; energia di rotazione, energia di vibrazione (oscillatore armonico e anarmonico); popolamento dei livelli energetici, spettro della molecola CO; transizioni tra stati stazionari

Molecole biatomiche e poliatomiche: modi normali di vibrazione, coordinate normali, simmetrie dei modi di vibrazione (modi di "stretching" e di "bending"); coordinate di simmetria; regole di selezione ottenute dalla simmetria delle funzioni d'onda; diagrammi di correlazione

Individuazione della struttura di un composto dal confronto teorico-sperimentale degli spettri IR e/o Raman.

Testi consigliati:

"Geometria molecolare: il modello VSEPR", R.J. Gillespie, I. Hargittai (Ed. Zanichelli)

"Fondamenti di Chimica - Legame Chimico", M.Capitelli, R. Celiberto, C. Gorse, S. Longo (Ed. Adriatica)

“Symmetry and Spectroscopy: An introduction to vibrational and electronic spectroscopy”, D.C. Harris, M.D. Bertolucci (Ed. Dover Publ.)
“Molecular Symmetry and group theory”, R.L. Carter (Ed. J. Wiley)

Testo di consultazione:

“Molecular vibrations: the theory of Infrared and Raman vibrational spectra” E.B. Wilson Jr., J.C. Decius, P.C. Cross (Ed. Dover Publ.)

Claudine Gorse

Posizione: Professore Ordinario di Chimica Generale ed Inorganica (Università di Bari)

Attività di ricerca: Proprietà di trasporto, Cinetica Chimica di non-equilibrio, Chimica dei plasmi, Problemi di rientro nell'atmosfera, Plasmi di ioni negativi

Co-editore del volume a multi-autori: "Plasma Technology: Fundamentals and Applications", Plenum 1992

Co-autore del volume a multi-autori: "Fondamenti di Chimica - Legame Chimico", Adriatica 2000

Co-autore di circa 150 lavori scientifici su riviste internazionali e libri a molti autori

Co-autore di circa 100 comunicazioni in congressi internazionali anche come relatore invitato

5 pubblicazioni scelte:

CAPITELLI M, CAPPELLETTI D, COLONNA G, GORSE C., LARICCHIUTA A, LIUTI G, LONGO S, PIRANI F. (2007)

On the possibility of using modelpotentials for collision integral calculations of interest for planetary atmospheres

CHEMICAL PHYSICS

vol. 338, pp. 62-68, ISSN: 0301-0104.

CAPITELLI M, ARMENISE I, BRUNO D, CACCIATORE M, CELIBERTO R, COLONNA G, DE PASCALE O, DIOMEDE P, ESPOSITO F, GORSE C., HASSOUNI K, LARICCHIUTA A, LONGO S, PAGANO D, PIETANZA D AND RUTIGLIANO M. (2007)

Non-equilibrium plasma kinetics: a state-to-state approach

PLASMA SOURCES SCIENCE & TECHNOLOGY

vol. 16, pp. S30S44-S44, ISSN: 0963-0252, doi:10.1088/0963-0252/16/1/S03.

PAGANO D, GORSE C., CAPITELLI M. (2007)

Modeling Multicusp Negative Ion Sources

IEEE TRANSACTIONS ON PLASMA SCIENCE

vol. 35, pp 1247-1259, ISSN: 0093-3813

CAPITELLI M, CELIBERTO R, GORSE C., LARICCHIUTA A, PAGANO D, TRAVERSA P. (2004)

Transport properties of local thermodynamic equilibrium hydrogen plasmas including electronically excited states

PHYSICAL REVIEW E, STATISTICAL, NONLINEAR, AND SOFT MATTER PHYSICS

vol. 69, pp. 026412-1-026412-10, ISSN: 1539-3755

ARMENISE I, BARBATO M, CAPITELLI M, GORSE C. (2004)

Surface Recombination Coefficients and Boundary-Layer Hypersonic-Flow Calculations on Different Surfaces

JOURNAL OF SPACECRAFT AND ROCKETS

vol. 41, pp. 310-313 ISSN: 0022-4650.