

UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI BARI ALDO MORO ANNO ACCADEMICO _2016/_17_

DIPARTIMENTO INTERATENEO DI FISICA

Programma dell'insegnamento di: _Strutturistica Chimica_____

Corso di Laurea Magistrale in _Fisica_____

SSD insegnamento _CHIM03_ CFU _6_ ore lezione _40_ ore eserc. _15_ ore labor. ____

Finalità del corso

Apprendere l'applicazione della teoria della simmetria puntuale alla spettroscopia di sostanze inorganiche, in particolare ai modi di vibrazione attivi IR e Raman sia di specie isolate che in cristalli, e alla spettroscopia visibile/uv di specie contenenti metalli di transizione.

Contenuti del corso (in dettaglio - lingua italiana - aggiungere righe se necessario)

Elementi, operazioni e gruppi di simmetria. Assi di rotazione propria e impropria, piani di simmetria, centro di inversione. Simmetrie molecolari. Proiezioni stereografiche: costruzione per alcuni gruppi e ricerca del gruppo più piccolo con dati elementi di simmetria. Prodotto di gruppi, in particolare con Ci. Rappresentazioni riducibili e irriducibili. Simboli di Mulliken. Rappresentazioni generate da orbitali e da modi di vibrazione. Relazione tra degenerazione e dimensione delle rappresentazione. Tavole dei caratteri. Formula di riduzione. Applicazione a spettri IR/Raman. Simmetrie speciali: tetraedro, cubo ed icosaedro. Relazione tra simmetrie Td, Th, Ih. Teoria del campo cristallino. Termini atomici e ionici nei cristalli, in particolare nel caso dei gruppi Td/Oh per diverse configurazioni dn. Transizioni permesse per ioni di elementi d in reticoli cristallini e in soluzione. Diagrammi di Tanabe-Sugano. Cenni alla tecnica del gruppo fattore per solidi e alle correlazioni ascendenti e discendenti. Esempi ed esercizi.

Contenuti del corso (in lingua inglese)

Elements, operations and symmetry groups. Axis of proper and improper rotation, symmetry planes, inversion center. Molecular symmetries. Stereographic projections: building for some groups and research of the smallest group with given symmetry elements. Product groups, in particular with Ci. Reducible and irreducible representations. Mulliken symbols. Representations generated by orbital and vibrational modes. Relation between degeneration and dimension of the representation. Character tables. Reduction formula. Application to IR / Raman spectra. Special symmetries: tetrahedron, cube and icosahedron. Relationship between symmetries: Td, Th, Ih. Crystal field theory. Atomic and ionic terms in crystals, especially in the case of Td / Oh symmetry for different dn configurations. Allowed transitions for d elements in crystals and in solution. Tanabe-Sugano diagrams. Introduction to the factor group for solids, ascending and descending correlations. Examples and exercises.

Bibliografia _ J.P.Fackler Jr. Symmetry in Coordination Chemistry
D.C.Harris, M.D.Bertolucci, Symmetry and Spectroscopy

modalità espletamento prova di esame: Discussione di un caso di studio. _____

E-mail del docente e/o suoi collaboratori savino.longo@uniba.it

ricevimento studenti: 12-13, 16-17 ; presso studio del docente_____

N.B. Barrare quello che non interessa

nel/i giorno/i _Mar Mer Gio_; periodo dal _1/9_ al _31/7_

N.B. Barrare quello che non interessa