UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI DI MILANO-BICOCCA

COURSE SYLLABUS

Spectroscopy of Inorganic Compounds

2122-1-F5401Q064

Obiettivi

Lo scopo del corso è di introdurre lo studente alla spettroscopia vibrazionale, elettronica e magnetica facendo uso estensivo della teoria dei gruppi e della meccanica quantistica come strumenti essenziali per la pratica moderna della spettroscopia sui complessi di metalli di transizione.

Contenuti sintetici

Parte I: Teoria dei gruppi e teoria degli orbitali molecolari. Parte II: Introduzione alla spettroscopia. Spettroscopia vibrazionale. Esercitazione I (Analisi dello spettro vibrazionale di $Mn(CO)_5Br$). Parte III: Metodi di calcolo quantomeccanici (Teoria del funzionale della densità). Parte IV: Spettroscopia UV-visibile. Esercitazione II (Analisi dello spettro UV-vis di $[Ti(H_2O)_6]^{3+}$). Parte V: Spettroscopia EPR. Esercitazione III (Analisi dello spettro EPR di $[Ti(H_2O)_6]^{3+}$) ed Esercitazione IV (Analisi dello spettro EPR di N_2^- in solidi ionici: KCl e MgO).

Programma esteso

Parte I: Teoria dei gruppi. Gruppi puntuali. Simmetria. Tabelle dei caratteri. Rappresentazioni riducibili e irriducibili. Formula di decomposizione. Teoria degli orbitali molecolari. LCAO. Teoria delle perturbazioni. Operatori di proiezione. Parte II: Introduzione alla spettroscopia. Spettroscopia vibrazionale. Momento di dipolo di transizione. Regole di selezione di simmetria. Modi normali di vibrazione. Esercitazione I (Analisi dello spettro vibrazionale di $Mn(CO)_5Br$). Parte III: Metodi di calcolo quantomeccanici. Funzioni di base. Ripasso della teoria Hartree-Fock. Fondamenti della teoria del funzionale della densità (DFT). Formalismo di Kohn-Sham. Tipi di funzionali di scambio e correlazione. Parte IV: Spettroscopia UV-visibile. Transizioni elettroniche. Principio di Franck-Condon. Forza del

dipolo di transizione. Regole di selezione di spin e di simmetria. Forza dell'oscillatore. Simboli di termine. Campo cristallino. Effetto Jahn-Teller. Transizioni d-d. Accoppiamento vibronico. Diagrammi di Orgel e di Tanabe Sugano. Serie spettrochimica. Calcolo delle energie di eccitazione con Time-Dependent DFT (TD-DFT). Esercitazione II (Analisi dello spettro UV-vis di $[Ti(H_2O)_6]^{3+}$). Parte V: Spettroscopia EPR. Magnetismo. Effetto Zeeman. Interazione iperfine. Accoppiamento spin-orbita. Tensore g. Tensore iperfine A. Isotropia e anisotropia. Esercitazione III (Analisi dello spettro EPR di $[Ti(H_2O)_6]^{3+}$). Esercitazione IV (Analisi dello spettro EPR di N_2^- in solidi ionici: KCl e MgO).

Prerequisiti

Conoscenze di meccanica quantistica.

Modalità didattica

Lezioni in aula con presentazione powerpoint ed esercitazioni in laboratorio computazionale.

Materiale didattico

Materiale didattico in forma di slide e appunti fornito dal docente.

Testi: Symmetry and spectroscopy by D. C. Harris and M. D. Bertolucci (Dover).

Physical methods in chemistry by R. S. Drago (Saunders).

Periodo di erogazione dell'insegnamento

Secondo semestre.

Modalità di verifica del profitto e valutazione

Le relazioni vanno consegnate almeno una settimana prima rispetto alla data dell'appello d'esame.

Vengono valutate le relazioni sulle esercitazioni, sia quelle computazionali svolte nel laboratorio informatico, sia quelle sperimentali svolte nel laboratorio chimico con una votazione in trentesimi. Questa valutazione deve essere superiore o uguale a 18/30 per essere ammessi alla prova orale.

La prova orale consiste in una prima parte di discussione di eventuali errori o mancanze nelle relazioni. Successivamente vengono poste alcune domande sia di natura generale che più di dettagli sugli argomenti svolti in aula durante le lezioni frontali sia sui contenuti delle esercitazioni svolte in laboratorio.

Orario di ricevimento

Il docente riceve previo appuntamento.