UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI DI MILANO-BICOCCA

COURSE SYLLABUS

Theory and Methods of Spectroscopies

2627-1-F5402Q009

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.

- Conoscenze e capacità di comprensione
  Lo studente deve dimostrare di possedere le conoscenze e gli strumenti metodologici necessari per interpretare i fenomeni alla base della interazione della radiazione elettromagnetica con la materia. Lo studente deve essere in grado di individuare autonomamente quali sono i fattori che determinano la probabilità di osservare assorbimento della luce da parte del sistema molecolare investigato. Lo studente deve essere in grado di definire le regole di selezione per le diverse spettroscopie. Lo studente deve familiarizzare con i termini propri della disciplina, e spiegare a persone esperte le nozioni sulle interazione luce/materia, la loro relazione con le spettroscopie e la loro applicazione a sistemi semplici nella chimica di coordinazione.
- Conoscenza e capacità di comprensione applicate
  Lo studente deve dimostrare di essere in grado di risolvere svolgere calcoli di chimica quantistica molecolare con il codice Gaussian per ottenere le frequenze di vibrazione, le energie degli orbitali molecolari, le energie di eccitazione e i parametri di spettroscopia di risonanza elettronica per sistemi semplici di composti di coordinazione.
- Autonomia di giudizio
  Lo studente ha la capacità di raccogliere e interpretare i dati ritenuti utili a determinare la risposta ad un problema quantitativo o qualitativo dato, relativo a proprietà spettroscopiche di un sistema molecolare. Lo studente ha la capacità di integrare le conoscenze e gestire la complessità, nonché di formulare conclusioni sulla base delle parziali informazioni raccolte.
- Abilità comunicative
  Lo studente, grazie alla stesura di una relazione scritta delle esperienze di laboratorio di chimica quantistica, sa comunicare in modo chiaro e privo di ambiguità informazioni, idee, problemi e soluzioni relativi alle proprietà spettroscopiche di sistemi molecolari a interlocutori specialisti e non specialisti.
- Capacità di apprendimento

Lo studente sviluppa quelle capacità di apprendimento che sono necessarie per intraprendere studi successivi e attività di ricerca per lo più in modo auto-diretto o autonomo.

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)?Br). 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?O)?]^{3}?). Parte V: Spettroscopia EPR. Esercitazione III (Analisi dello spettro EPR di [Ti(H?O)?]^{3}?).

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)?Br). 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?O)?]^{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?O)?]^{3}?).

Prerequisiti

Conoscenze di meccanica quantistica.

Modalità didattica

16 lezioni da 2 ore in presenza, Didattica Erogativa
6 attività di laboratorio da 4 ore in presenza con frequenza obbligatoria, Didattica Interattiva

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

Vengono valutate le relazioni sulla parte di laboratorio computazionale che andranno consegnate almeno una settimana prima rispetto alla data dell'appello d'esame.
La prova orale consiste in una prima parte di discussione sulle 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.

La valutazione positivi (18-30L) viene stabilita secondo i seguenti criteri:
18-19: preparazione su un numero ridotto di argomenti presenti nel programma del corso, con capacità di trattazione e analisi limitate che, nel caso della prova orale, emergono solo a seguito dell'aiuto e delle domande del docente; competenza espositiva e lessico non sempre corretti, con una capacità di elaborazione critica limitata;
20-23: preparazione su una parte degli argomenti presenti nel programma del corso, capacità di analisi autonoma solo su questioni puramente pratiche ed esecutive, uso di un lessico corretto anche se non del tutto accurato e chiaro e di una capacità espositiva a tratti incerta;
24-27: preparazione su un numero ampio di argomenti trattati nel programma del corso, capacità di svolgere in modo autonomo l'argomentazione e l'analisi critica, capacità di applicazione delle conoscenze ai contesti e collegamento dei temi a casi concreti, uso di un lessico corretto e competenza nell'uso del linguaggio disciplinare;
28 – 30/30L: preparazione completa ed esaustiva sugli argomenti in programma d'esame, capacità personale di trattazione autonoma e di analisi critica dei temi, capacità di riflessione e autoriflessione e di collegamento dei temi a casi concreti e a diversi contesti, ottima capacità di pensiero critico e autonomo, piena padronanza del lessico disciplinare e di una capacità espositiva rigorosa e articolata, capacità di argomentazione, riflessione e di autoriflessione, capacità di collegamenti ad altre discipline.

Orario di ricevimento

Il docente riceve previo appuntamento.

Sustainable Development Goals

ENERGIA PULITA E ACCESSIBILE