UNIVERSITÀ DI PISA

STRUTTURISTICA CHIMICA

FRANCA MARIA FLORIS

Academic year	2020/21
Course	CHIMICA
Code	212CC
Credits	3

Modules	Area	Type	Hours	Teacher(s)
STRUTTURISTICA CHIMICA	CHIM/02	LEZIONI	24	FRANCA MARIA FLORIS

Obiettivi di apprendimento

Conoscenze

Alla fine del corso lo studente avrà una solida conscenza della teoria dei gruppi e della teoria delle rappresentazioni applicata allo studio di molecole. In particolare ci si aspetta che uno studente sia in grado di classificare una molecola in accordo alla sua simmetria, di costruire una matrice di rappresentazione del gruppo rispetto una base, di costruire funzioni di simmetria per proiezione e spostamento e di usare la simmetria nella valutazione di integrali.

Modalità di verifica delle conoscenze

Durante l'esame orale lo studente deve essere capace di dimostrare di conoscere gli argomenti trattati nel corso e di discuterne i principali contenuti usando l'aprropriato formalismo e terminologia.

Capacità

Al termine del corso lo studente sarà in grado di:

- discutere una presentazione orale sull'attività svolta durante il corso
- classificare una molecola in accordo alle operazioni di simmetria
- costruire la tabella dei caratteri di un gruppo
- classificare per simmetria un operatore
- costruire la matrice di rappresentazione di un gruppo rispetto ad una base
- costruire funzioni di simmetria (SALC)
- usare la simmetria per la classificazione delle vibrazioni molecolari
- usare la simmetria per valutare se un integrale è nullo

Modalità di verifica delle capacità

- saranno svolti esercizi in cui è richiesta la partecipazione attiva dello studente
- lo studente dovrà risolvere un problema specifico con uso della simmetria

Comportamenti

Saranno acquisite:

- consapevolezza sulle implicazioni della simmetria in chimica quantistica e spettroscopia
- appropriato linguaggio e formalismo
- accuratezza nell'applicazione della teoria dei gruppi

Prerequisiti (conoscenze iniziali)

Conoscenze di base di Matematica e Chimica Fisica.

Indicazioni metodologiche

- lezioni frontali
- ricevimenti
- in presenza di studenti stranieri potrà essere usata la lingua inglese

Programma (contenuti dell'insegnamento)

Basi di vettori e di funzioni. Cambiamenti di base. Trasformazione lineare e matrice di rappresentazione. Trasformazione di similarità..
Definizione di gruppo. Tabella di moltiplicazione. Sottogruppo e laterali. Classi. Omomorfismo e isomorfismo.
Gruppi puntuali. Teoremi geometrici. Rappresentazioni di un gruppo. Riducibilità e irriducibilità di una rappresentazione.
Teorema della grande e della piccola ortogonalità. Significato delle relazioni di ortogonalità. Numero di rappresentazioni irriducibili distinte.
Prodotto diretto di rappresentazioni. Trasformazioni di funzioni e operatori indotte da operazioni di simmetria. Invarianza. Simmetria e problema ad auotovalori. Simmetria e degenerazione.Operatori di Wigner. SALC. Simmetria, integrali e regole di selezione. Simmetria e classificazione di stati vibrazionali.

Bibliografia e materiale didattico

Testi raccomandati: (1) C. Amovilli, "Lezioni di Strutturistica Chimica", SEU, Università degli Studi di Pisa. (2) P. W. Atkins, "Molecular Quantum Mechanics", Oxford University Press (3) R. McWeeny, "Symmetry. An introduction to Group Theory and its applications" (4) A. J. Ceulemans, "Group Theory applied to chemistry", Springer (5) F. A. Cotton, "Chemical Applications of Group Theory", Wiley Interscience (6) L. H. Hall, "Group Theory and symmetry in Chemistry", Mc-Graw-Hill

Indicazioni per non frequentanti

E' consigliato seguire costantemente le lezioni, sebbene frequentare il corso non sia obbligatorio.
Agli studenti non frequentanti è comunque consigliato di prendere contatto con il docente del corso.

Modalità d'esame

- L'esame si svolge in una prova orale che ha la durata minima di 30 minuti.
- La prova orale si svolge davanti ad una commissione costituita dal docente che ha tenuto il corso e da docenti esperti della materia.
- Oltre che rispondere a domande sulla teoria, al candidato sarà richiesto di risolvere (o impostare la soluzione) di un problema in cui si fà uso della simmetria (costruzione di SALC, simmetria dei modi normali etc.).
- La prova orale non è superata se il candidato mostra ripetutamente di non aver appreso i concetti fondamentali del corso e se non è in grado di applicarli a un problema in cui è richiesto l'uso della simmetria.

Ultimo aggiornamento 23/09/2020 16:24