Syllabus**: APPLICAZIONI CHIMICHE DELLA SIMMETRIA MOLECOLARE**

**Lingua insegnamento:** italiano

**Contenuti:** Introduzione alla teoria dei gruppi. Definizioni e teoremi. Simmetria molecolare e gruppi di simmetria puntuali. Esempi illustrativi. Rappresentazioni dei gruppi, rappresentazioni riducibili e irriducibili. Riduzione di rappresentazioni riducibili. Rappresentazioni prodotto diretto. Teoria dei gruppi e meccanica quantistica. Operazioni di simmetria su funzioni d’ onda e operatori. Autostati dell’Hamiltoniano e irriducibilità; regole di selezione. Applicazioni: teoria degli orbitali molecolari, metodo LCAO, esempi illustrativi su molecole organiche, organometalliche ed inorganiche. Vibrazioni Molecolari. Modi normali, coordinate normali e loro proprietà di simmetria. Regole di selezione nella spettroscopia IR e Raman. Splitting dei livelli energetici causati da una perturbazione. Teoria del campo dei leganti. Il gruppo delle rotazioni. Armoniche sferiche, coefficienti di Clebsh-Gordan. Operatori tensoriali e teorema di Wigner-Eckart. Gruppi spaziali e stati elettronici nei cristalli.

**Testi di riferimento:** F.A. Cotton**, “**Chemical applications of group theory”, 3rd Ed. Wiley, 1990.

M. Tinkham “Group Theory and Quantum Mechanics”, Dover 2003.

D. M. Bishop, “Group Theory and Chemistry “, Dover, 1993.

R. McWeeny, Symmetry: An Introduction to Group Theory and its Applications, Macmillan: New York, 1963.

M. Hamermesh, Group Theory and its Application to Physical Problems, Addison-Wesley: Reading, MA, 1962.

**Obiettivi formativi:** Conoscenza e uso della simmetria molecolare per la risoluzione di problemi di struttura e di reattività in ambito organico, inorganico e chimico-fisico

**Prerequisiti:** Chimica generale,Chimica Fisica 2

**Metodi didattici:** Lezioni frontali

**Altre informazioni:**

**Modalità di verifica dell'apprendimento:** La verifica dell'apprendimento avviene attraverso test scritti e la valutazione delle attività di approfondimento su argomenti del corso. Gli studenti possono sempre svolgere un esame orale finale.

**Programma esteso:** Definizioni e teoremi di teoria dei gruppi. Proprietà ed esempi. Isomorfismo e Omomorfismo. Sottogruppi. Elementi coniugati e classi. Simmetria molecolare e gruppi di simmetria. Elementi di simmetria e operazioni di simmetria. Gruppi di simmetria puntuale e loro notazione. Classificazione della simmetria molecolare. Esempi. Cenni di algebra lineare. Spazi vettoriali, sottospazi e sottospazi invarianti. Concetto di base e basi ortonormali. Operatori unitari e Hermitiani. Matrici unitarie e Hermitiane. Problema ad autovalori algebrico. Rappresentazioni di un gruppo. Rappresentazioni equivalenti. Rappresentazioni riducibili e irriducibili. Effetto degli operatori di simmetria su funzioni. Il “Great Orthogonality Theorem” e le sue conseguenze. Carattere di una rappresentazione. Riduzione di una rappresentazione riducibile. Rappresentazione di un gruppo prodotto diretto. Cenni sulla costruzione delle tabelle dei caratteri. Teoria dei gruppi e meccanica quantistica. Trasformazioni di simmetria di funzioni d’ onda e operatori. Autostati dell’operatore Hamiltoniano e irriducibilità. Regole di selezione. Costruzione degli operatori di proiezione e loro uso per la costruzione di basi adattate alla simmetria. Teoria degli orbitali molecolari e applicazioni. Sistemi carbociclici, sistema π in benzene e naftalene. Orbitali ibridi. Vibrazioni molecolari. Modi normali e coordinate normali. Classificazione di simmetria delle coordinate normali. Regole di selezione per la spettroscopia IR e Raman. Abbassamento della degenerazione a seguito di una perturbazione. Teoria del campo dei leganti. Termini. Coefficienti di Clebsch-Gordan e teorema di Wigner-Eckart.

Cenni sul gruppo delle rotazioni. Parametrizzazione in termini di angoli di Eulero. Rotazioni come operatori. Armoniche sferiche. Addizione di momenti angolari. Cenno sugli operatori tensoriali e teorema di Wigner-Eckart. Cenni su simmetria traslazionale dei cristalli. Reticoli di Bravais e cella unitaria di Wigner-Seitz.. Gruppi spaziali e loro nomenclatura. Reticolo reciproco e Brillouin zone. Funzioni d’onda nei cristalli. Condizioni al contorno cicliche o di Born – von Karman. Teorema di Bloch e funzioni di Bloch. Band structure theory.

**Lingua insegnamento:** Italian

**Contenuti:** Introductionto group theory. Theorems and definitions. Molecular symmetry and point groups. Illustrative examples. Representations of a group. Reducible and irreducible representations. Reduction of reducible representations. Direct product representations. Group theory and quantum mechanics. Symmetry transformations of wave functions and quantum-mechanical operators. Eigenstates of the Hamiltonian and irreducibility. Selection Rules. Applications: Molecular Orbital theory, MO LCAO method, applications on organic, organometallic and inorganic systems. Molecular vibrations. Normal modes, normal coordinates and their symmetry properties. Selection rules for IR and Raman spectroscopies. Splitting of energy levels by a perturbation. Ligand field theory. The rotation group, spherical harmonics and Clebsch-Gordan coefficients. Tensor operators and Wigner-Eckart theorem. Space groups and electronic states in crystals.

**Testi di riferimento:** F.A. Cotton**, “**Chemical applications of group theory”, 3rd Ed. Wiley, 1990.

M. Tinkham “Group Theory and Quantum Mechanics”, Dover 2003.

D. M. Bishop, “Group Theory and Chemistry “, Dover, 1993.

R. McWeeny, Symmetry: An Introduction to Group Theory and its Applications, Macmillan: New York, 1963.

M. Hamermesh, Group Theory and its Application to Physical Problems, Addison-Wesley: Reading, MA, 1962.

**Obiettivi formativi:** Application of group theory formalisms to the solution of problems of chemical relevance (structure and reactivity).

**Prerequisiti:** Chimica generale,Chimica Fisica 2

**Metodi didattici:** Lectures

**Altre informazioni:**

**Modalità di verifica dell'apprendimento:** The assessment of learning takes place through written tests and evaluation of in-depth activities on topics of the course. Students can perform a final oral examination.

**Programma esteso:** Group theory, theorems and definitions. Properties and illustrative examples. Isomorphism and homomorphism. Subgroups. Conjugate elements and classes. Molecular symmetry and point groups. Symmetry elements and symmetry operations. Point groups and their notation. Molecular symmetry classification. Illustrative examples. Short introduction to linear algebra: vector spaces, subspaces, and invariant subspaces. Bases and orthonormal bases. Unitary and Hermitean operators. Unitary and Hermitean matrices. Algebraic eigenvalue problem. Group representations. Equivalent representations. Reducible and irreducible representations. Effect of symmetry transformation operators on functions. General representation theory, the Great Orthogonality Theorem. Characters. Reduction of reducible representations. Representation of a direct product group. Brief overview on the construction of character tables. Group theory and quantum mechanics. Symmetry transformations of wave functions and quantum mechanical operators. Eigenstates of the Hamiltonian and irreducibility. Selection rules. Construction and use of projection operators. Molecular orbital theory. Selected applications on carbocyclic systems, π bonding in benzene and naphtalene, hybrid orbitals. Molecular vibrations. Normal modes and normal coordinates. Symmetry classification of normal coordinates. Selection rules in IR and Raman spectroscopies. Symmetry lowering by a perturbation. Ligand field theory. Multiplet terms in molecules. Clebsch-Gordan coefficients and Wigner-Eckart theorem.

Brief overview of the rotation group. Rotation and Euler angles. Rotations as operators. Spherical harmonics. Addition of angular momenta. Tensor operators and Wigner-Eckart theorem. Translational symmetry in crystals. Bravais lattices and the Wigner-Seitz unit cell. Nomenclature of space groups. Reciprocal lattice and the Brillouin zone. Electronic states in crystals. Cyclic boundary conditions (Born – von Karman boundary conditions) . Bloch theorem and Bloch functions. Band structure theory.