



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DELL'AQUILA



DIPARTIMENTO DI SCIENZE FISICHE E CHIMICHE

*Università degli Studi dell'Aquila*  
*Dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche*  
*Corso di Laurea in Fisica*  
*Corso di Laurea in Scienze e Tecnologie Chimiche e dei Materiali*

*Seminari per studenti delle Lauree Triennali*  
*A.A. 2015/2016*

**Via Vetoio, Loc. Coppito, L'Aquila**  
**Edificio "Renato Ricamo" (Coppito 1)**  
**Aula 1.6 (primo piano)**

**Mercoledì 20 Aprile 2016 h. 14.00**

**Prof. Fabio Ramondo**

*Strutture molecolari mediante metodi quantomeccanici ab initio*

Lo studio della struttura di una molecola equivale ad una completa caratterizzazione di tutte le possibili disposizioni dei suoi atomi nello spazio. Occorre quindi esplorare in modo completo ed accurato l'intera superficie di energia potenziale molecolare in tutti i suoi punti critici e nel loro intorno. Ciascuno di questi punti può essere identificato come una struttura stabile (isomero) o eventualmente una struttura di transizione che connette più isomeri. Accanto alle tecniche sperimentali (spettroscopiche e diffrattometriche) che consentono di determinare geometrie di molecole nei diversi stati di aggregazione, le metodologie basate su modelli teorici sono valide e alternative tecniche di indagine strutturale alle quali si ricorre sempre più spesso. L'accuratezza della struttura è chiaramente funzione del livello teorico applicato e delle approssimazioni introdotte. Metodi quantomeccanici ab initio di elevato livello possono essere attualmente applicati a molecole di medie dimensioni (fino ad un centinaio di atomi): geometrie molecolari e frequenze di vibrazione possono quindi essere ricavate teoricamente con un buon livello di accuratezza. I tempi di calcolo relativamente brevi consentono inoltre di creare piccoli databases adatti ad evidenziare importanti effetti intra- e intermolecolari e in alcuni casi a fattorizzare i loro contributi. Confrontare molecole strutturalmente simili nelle quali si varia sistematicamente uno o più gruppi funzionali rivela ad esempio l'esistenza di effetti elettronici, sterici e di risonanza; in alternativa cambiare gradualmente l'intorno chimico di una molecola può evidenziare gli effetti prodotti dal solvente sulla struttura molecolare.