UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI BARI ALDO MORO

Dipartimento di Chimica

Principali informazioni sull'insegnamento	
Denominazione dell'insegnamento	Simmetria Molecolare
Corso di studio	Scienze Chimiche LM-54
Anno di corso	1
Crediti formativi universitari (CFU) / European Credit Transfer and Accumulation System (ECTS):	4
SSD	CHIM03
Lingua di erogazione	Italiano
Periodo di erogazione	Secondo semestre
Obbligo di frequenza	No

Docente	
Nome e cognome	Savino Longo
Indirizzo mail	Savino.longo@uniba.it
Telefono	0805442088
Sede	Dipartimento di Chimica
Sede virtuale	Teams del corso
Ricevimento (giorni, orari e modalità)	Lunedì-Venerdì 12-13, 16-17 in presenza e online, su appuntamento

Syllabus	
Obiettivi formativi	Insegnare allo studente l'applicazione della teoria della simmetria ai sistemi molecolari. Costruire rappresentazione stereografiche e usarle per costruire la simmetria molecolare più semplice con dati elementi. Saper usare le tavole dei caratteri. Fare previsioni di spettri IR e Raman e discussioni di orbitali molecolari.
Prerequisiti	Matematica di base (algebra), Chimica inorganica (orbitali molecolari), Chimica Fisica (spettroscopia IR/Raman).
Contenuti di insegnamento (Programma)	Operazioni di simmetria, gruppi di simmetria, rappresentazioni riducibili e irriducibili. Costruzione di proiezioni stereografiche. Simmetria locale di un gruppo di atomi equivalenti nel contesto di una simmetria globale. Tavole dei caratteri. Determinazione del numero di modi attivi IR e Raman per gruppi di legami equivalenti. Applicazioni alla determinazione delle SALC, degli orbitali molecolari e dello schema dei livelli elettronici. Applicazione alla determinazione strutturale. Discussione di numerosi casi di studio tratti dai testi di riferimento, con l'analisi degli effetti della simmetria, della forza dei legami, delle masse atomiche e dell'ambiente chimico locale nel caso di sostanze cristalline.
Testi di riferimento	1) Ogden, Introduction to molecular symmetry, Oxford Chemistry Series 2) Harris, Daniel C., and Michael D. Bertolucci. Symmetry and spectroscopy: an introduction to vibrational and electronic spectroscopy. Dover 3) John Fackler Jr. Symmetry in Coordination Chemistry, Academic press
Note ai testi di riferimento	Il primo testo fornisce una introduzione complessiva alla simmetria e alla spettroscopia IR/Raman. Lo studio del primo e quarto capitolo del secondo testo è utile per comprendere le proiezioni stereografiche e gli orbitali. In alternativa si può impiegare il terzo testo, capitoli 1, 3, 4, la sola sezione MO dal cap. 5 e dal cap. 4 del secondo testo, gli esempi strutturali dal cap. 6. Le tavole dei caratteri da usare per l'esame sono quelle in appendice al testo 1 o al testo 3.

Organizzazione della didattica			
Ore			
Totali	Didattica frontale	Pratica (laboratorio, campo, esercitazione, altro)	Studio individuale
100	46		54
CFU/ETCS			
4			

Metodi didattici	
	Lezioni frontali mediante impiego di lavagna tradizionale. Impiego di modelli molecolari. Gli studenti sono incoraggiati a realizzare disegni su base assonometrica della struttura tridimensionale di strutture, modi di vibrazione ed orbitali.

Risultati di apprendimento previsti	
Conoscenza e capacità di comprensione	Impiego dei concetti della teoria dei gruppi nella chimica inorganica strutturale. Saper visualizzare la struttura tridimensionale di un sistema molecolare e di insiemi
Conoscenza e capacità di comprensione applicate	Determinare le simmetrie di diversi sottosistemi nell'ambito di sistemi inorganici complessi. Ottenere informazioni strutturali da spettri IR e Raman.
Competenze trasversali	• Autonomia di giudizio Saper scegliere la strategia ritenuta più adatta tra quelle proposte, per uno specifico caso di studio, argomentando la scelta e dimostrandone la validità. • Abilità comunicative Saper esporre le particolarità di casi di studio e proporre tecniche di soluzione, la discussione in aula, nel corso della lezione, è anche a questo scopo incoraggiata • Capacità di apprendere in modo autonomo Saper estrarre le informazioni di impiego operativo per casi di studio da testi e siti

Valutazione	
Modalità di verifica dell'apprendimento	Colloquio orale ed impiego di lavagna. Lo studente ha a sua disposizione le tavole dei caratteri tra cui selezionare quelle adatte al problema specifico.
Criteri di valutazione	• Conoscenza e capacità di comprensione: ○ Lo studente conosce la teoria della simmetria ed i vantaggi che offre nella pratica della chimica • Conoscenza e capacità di comprensione applicate: ○ Lo studente sa applicare la teoria • Autonomia di giudizio: ○ Lo studente formula spiegazioni e modelli • Abilità comunicative: ○ Lo studente individua strategie risolutive per il caso specifico • Capacità di apprendere: ○ Lo studente rende proprie le nozioni esposte nella pratica
Criteri di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale	Lo studente deve saper applicare i metodi proposti, determinando le regole di selezione infrarosse/Raman, totali, o di gruppi specifici di legami equivalenti, o la simmetria degli orbitali molecolari ottenuti da una base proposta, in una o più molecole scelte dal docente. Deve inoltre saper realizzare proiezioni

	stereografiche e discutere la relazione tra simmetrie di sito e globali.
Altro	

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI BARI ALDO MORO

Dipartimento di Chimica

General information	
Academic subject	**Molecular Symmetry**
Degree course	Chemical Sciences LM-54
Academic Year	1
European Credit Transfer and Accumulation System (ECTS)	4
Language	Italian
Academic calendar (starting and ending date)	March-May 2022
Attendance	Not compulsory

Professor/ Lecturer	
Name and Surname	Savino Longo
E-mail	Savino.longo@uniba.it
Telephone	0805442088
Department and address	Chemistry Department – Via E. Orabona 4, 70126 Bari IT
Virtual headquarters	Teams
Tutoring (time and day)	Monday-Friday 12-13, 16-17 in person and online, by appointment

---

Syllabus	
Learning Objectives	Learning the application of symmetry theory to molecular systems. Constructing stereographic representations and use them to identify the simplest molecular symmetry compatible with given symmetry elements. Knowing how to use character tables. Making predictions of IR and Raman spectra. Constructing molecular orbitals.
Course prerequisites	Basic mathematics (algebra), Inorganic chemistry (molecular orbitals), Physical chemistry (IR / Raman spectroscopy).
Contents	Symmetry operations, symmetry groups, reducible representations e irreducible. Construction of stereographic projections. Local symmetry of a group of equivalent atoms in the context of a global symmetry. Character tables. Determination of the number of IR and Raman active modes for groups of equivalent bonds. Applications to the determination of SALCs, molecular orbitals and electron level schemes. Application to structural determination. Discussion of numerous case studies taken from the reference texts, with the analysis of the effects of symmetry, the strength of bonds, atomic masses and local chemical environment in the case of crystalline substances.
Books and bibliography	1) Ogden, Introduction to molecular symmetry, Oxford Chemistry Series 2) Harris, Daniel C., and Michael D. Bertolucci. Symmetry and spectroscopy: an introduction to vibrational and electronic spectroscopy. Dover 3) John Fackler Jr. Symmetry in Coordination Chemistry, Academic press
Additional materials	The first text provides an overall introduction to symmetry and to IR / Raman spectroscopy. The study of the first and fourth chapters of the second text is useful for understanding stereographic projections and orbitals. Alternatively, you can use the third text, chapters 1, 3, 4, only the section on MO from chap. 5 and from chap. 4 of the second text, the structural examples from chap. 6. The character tables to be used for the exams are those in the appendix of text 1 or text 3.

Work schedule			
Total	Lectures	Hands on (Laboratory, working groups, seminars,	Out-of-class study

		field trips)	hours/ Self-study hours
Hours			
100	46		54
ECTS			
4			

Teaching strategy	
	Frontal lessons using a traditional blackboard. Use of Molecular models. Students are encouraged to make drawings on a base axonometric analysis of the three-dimensional structure of structures, modes of vibration and orbitals.
Expected learning outcomes	
Knowledge and understanding on:	Use of the concepts of group theory in structural inorganic chemistry. Knowing how to visualize the three-dimensional structure of a molecular system and ensembles
Applying knowledge and understanding on:	Determine the symmetries of different subsystems within complex inorganic systems. Obtain structural information from IR and Raman spectra.
Soft skills	• Making informed judgments and choices ○ Knowing how to choose the strategy considered most suitable among those proposed, for a specific case study, arguing the choice and demonstrating its validity. • Communicating knowledge and understanding ○ Knowing how to explain the particularities of case studies and propose solution techniques, the discussion in the classroom, during the lesson, is also encouraged for this purpose • Capacities to continue learning ○ Knowing how to extract operational use information for case studies from texts and sites

Assessment and feedback	
Methods of assessment	Oral interview and use of blackboard. The student has at his/her disposal the tables of characters from which to select those suitable for the specific problem.
Evaluation criteria	• Knowledge and understanding ○ The student knows the theory of symmetry and the advantages it offers in the practice of chemistry • Applying knowledge and understanding ○ The student knows how to apply the theory • Autonomy of judgment ○ The student formulates explanations and models • Communicating knowledge and understanding ○ The student identifies solution strategies for the specific case • Communication skills ○ Justifying techniques used with logical arguments • Capacities to continue learning ○ The student makes the notions presented in practice his own
Criteria for assessment and attribution of the final mark	The student must know how to apply the proposed methods, determining the infrared / Raman selection rules, total, or specific groups of equivalent bonds, or the symmetry of the molecular orbitals obtained from a proposed base, in one or more molecules chosen by the teacher. He/she must also be able to make

	stereographic projections and discuss the relationship between site and global symmetries.
Additional information	