

FISICA MOLECOLARE

A. A. 2004-05 A. Di Lieto

Introduzione agli spettri molecolari

Caratteristiche principali dei dati sperimentali. Larghezza di riga e differenti cause di allargamento. Coefficiente di assorbimento.

Spettrometri a microonde classici

Sorgenti, rivelatori, componenti. Tecniche di modulazione, amplificatori sincroni, problemi di rumore.

Metodi sperimentali della spettroscopia infrarossa

Spettrometri a reticolo, risoluzione, angolo di blaze. Spettrometri a trasformata di Fourier. Calibrazione. Apodizzazione.

Rivelatori infrarossi

Principi di funzionamento: rivelatori quantistici e termici. Caratterizzazione e parametri standard: responsività, NEP, D^* . Fotoconduttori, es. PbS. Fotovoltaici, es. HgCdTe. Rivelatori termici: bolometri, termovoltai, (termocoppie, termopile), pneumatici, piroelettrici.

Spettrometri laser

Laser a gas. Laser a stato solido. Spettroscopia sub-Doppler, assorbimento saturato, a due fotoni. Circuiti ad aggancio di fase, offset di frequenza.

Spettrometri Raman

Schema di principio di uno spettrometro Raman. Spettro Stokes e anti-Stokes. Spettri rotazionali e vibro-rotazionali Raman di gas molecolari.

Campioni di frequenza

Standard di frequenza e di tempo. Standard primario e campioni secondari. Laser stabilizzati in frequenza. Prospettive per nuovi campioni.

L'Hamiltoniana molecolare

L'approssimazione di Born-Oppenheimer.

Modelli per l'interpretazione delle molecole più semplici: H_2^+ e H_2 .

La vibrazione della molecola biatomica. Rotatore rigido e non.

Transizioni vibrazionali e rotazionali.

Modelli roto-vibrazionali. Effetti isotopici. Confronto con gli spettri infrarossi.

Simmetria molecolare e teoria dei gruppi

Elementi di teoria dei gruppi. Trasformazioni di simmetria. Gruppi puntuali.

Rappresentazioni di un gruppo. Rappresentazioni irriducibili e caratteri. Analisi di una rappresentazione riducibile.

Applicazione della teoria dei gruppi allo studio degli spettri molecolari.

Spettri vibrazionali

Gradi di libertà vibrazionali. Coordinate normali e interne.

Modi normali di vibrazione. Vibrazioni degeneri.

Effetto della simmetria su vibrazioni degeneri.

Spettri rotazionali

Molecole lineari. Rotatore simmetrico. Rotatore sferico. Rotatore asimmetrico.

Livelli energetici e loro proprietà di simmetria. Regole di selezione.