



# Appunti di Fisica '18 & Dottorato di Ricerca in Fisica

**1 marzo ore 15:00  
Sala seminari, CNR-IPCF**

## **Approcci chimico-computazionali allo studio di molecole organiche**

**Viviana Mollica Nardo**

(CNR, Istituto per i Processi Chimico-Fisici di Messina)

Gli approcci chimico-computazionali, ed in particolare i metodi DFT, sono sempre più di frequente associati agli approcci puramente sperimentali, a supporto o conferma del dato ottenuto. L'utilizzo di metodi DFT nello studio delle proprietà chimico-fisiche di una data specie è utile, ad esempio, per la comprensione di un determinato meccanismo di reazione. Le molecole oggetto di studio si possono collocare in contesti applicativi molto differenti.

Nello specifico, attraverso l'uso del programma Gaussian03 sono stati effettuati calcoli di ottimizzazione geometrica e di spettri IR e Raman di molecole organiche utilizzabili in svariati contesti applicativi che vanno dalla biologia ai beni culturali.

In particolare, verrà illustrato come esempio il calcolo di alcuni spettri SERS su due coloranti: indaco e purpurina.

Per prima cosa sono state disegnate e ottimizzate le geometrie delle molecole in presenza di atomi di argento opportunamente orientati. Dopo questa procedura di ottimizzazione sono stati calcolati gli spettri Raman e confrontati con quelli ottenuti sperimentalmente.

<http://sites.google.com/site/AppuntiDiFisicaMessina/>