

A.I.C.F.

Associazione Italiana di Chimica Fisica

**XVI CONGRESSO
NAZIONALE**

ABANO TERME 12-16 OTTOBRE 1981

RIASSUNTI

ANALISI DEI MODI NORMALI DI VIBRAZIONE DEL CRISTALLO
DI 2,2'-DIPIRIDILE

L. Angeloni, E. Castellucci, M. Muniz-Miranda, N. Neto,
G. Sbrana

Istituto di Chimica Fisica, Università di Firenze

Sono stati eseguiti i calcoli di modi normali di vibrazione per il cristallo 2,2'-dipiridile, sia nell'approssimazione del corpo rigido sia introducendo tutti i gradi di libertà, interni ed esterni, per le due molecole contenute nella cella elementare. Il potenziale intermolecolare è descritto da funzioni semi-empiriche atomo-atomo con campo di interazione fino a 6 Å. Il potenziale intramolecolare è stato introdotto utilizzando un adatto campo di forze di valenza. I risultati mostrano un buon accordo con i dati IR e Raman registrati in luce polarizzata su cristalli singoli e films policristallini.