

Relazioni triennali - Terza sessione 2014
Data Chiusura 23/01/2015

Cognome	PIETROPOLLI CHARMET
Nome	Andrea
Qualifica	Ricercatori Universitari
Dipartimento	Dipartimento di Scienze Molecolari e Nanosistemi
Ha usufruito di un periodo di congedo per motivi di studio nel triennio	No
Descrizione attività di ricerca	<p>Nel triennio in esame l'attività di ricerca scientifica ha preso in considerazione principalmente la determinazione dei parametri strutturali, spettroscopici ed energetici di molecole di interesse atmosferico (quali ad esempio CFC, HFC, ed eteni alogenati), l'analisi degli assorbimenti nella regione compresa tra il lontano e il vicino infrarosso, l'analisi dell'intensità di banda integrata e il relativo calcolo del potenziale impatto sui fenomeni di riscaldamento globale (con la conseguente determinazione del Global Warming Potential, GWP), e l'analisi del profilo di riga. Inoltre si è proseguita l'indagine sul processo di adsorbimento di potenziali inquinanti su substrati quali il biossido di titanio, TiO₂, sia per fornire le conoscenze di base adeguate per meglio caratterizzare tale fenomeno che per supportare l'impiego di tale semiconduttore nella fotodegradazione degli inquinanti.</p> <p>Nello svolgimento di tali attività di ricerca si è fatto uso di spettrometri a media e ad alta risoluzione; come strumento a media risoluzione si è impiegato lo spettrometro a trasformata di Fourier (FTIR) disponibile presso il Dipartimento di Scienze Molecolari e Nanosistemi (DSMN). Per le indagini ad alta risoluzione si è fatto uso dello spettrometro a diodo laser modulabile (TDL) presente nel laboratorio di Spettroscopia Molecolare del DSMN, e di spettrometri FTIR disponibili in altri laboratori e gruppi di ricerca. Per lo studio del Freon 13B1 (CF₃Br) si è impiegato anche lo spettrometro a diodo laser TDL accoppiato al sistema di getti molecolari impulsati presente nel laboratorio di Spettroscopia Molecolare del DSMN. Si è fatto inoltre ricorso ai metodi computazionali "ab initio" per avere informazioni teoriche riguardo alle varie costanti spettroscopiche (costanti rotazionali, coefficienti di distorsione centrifuga, costanti di anarmonicità) e ai fenomeni di risonanza anarmonica presenti nelle regioni spettrali esaminate. A tale scopo nel corso del triennio è stato altresì portato a termine un progetto computazionale eseguito nel sistema CINECA (ISCRA), svolto come principal investigator (PI), per l'analisi, mediante metodi ab initio, della dipendenza di parametri strutturali ed energetici di alcune molecole in funzione del livello di teoria confrontando le previsioni teoriche con i rispettivi dati sperimentali.</p> <p>In aggiunta, sempre mediante metodi ab initio, è stata investigata la dipendenza dalla temperatura dell'equilibrio di protonazione dell'indolo e la determinazione del suo valore di pKa al variare della temperatura, assieme allo studio del campo di forza armonico ed anarmonico.</p> <p>Per l'analisi vibrazionale le molecole prese in esame sono state derivati alogenati del metano e dell'etilene (tra i quali CH₂ClF, CH₂F₂, CF₃Br, CH₂BrF, CH₂=CHF, CF₂=CFCl). Per il biossido di zolfo e il difluorometano lo studio ha inoltre riguardato l'analisi dei profili di riga, anche in presenza di vari gas buffer. Per quanto concerne l'adsorbimento sul biossido di titanio, l'indagine si è focalizzata principalmente su di un derivato alogenato del metano (bromodifluorometano, CHBrF₂).</p> <p>Tali studi hanno portato alla pubblicazione di 14 articoli su riviste internazionali (dotate di sistema di referaggio peer-review), 1 lavoro su rivista nazionale, e a 15 contributi presentati a convegni e congressi internazionali.</p> <p>Nel triennio in esame come membro dell'Unità di Venezia si è partecipato al progetto PRIN 2009 dal titolo "Spettroscopia infrarossa a media e ad alta risoluzione di molecole di importanza atmosferica e astrofisica".</p>

Elenco delle
pubblicazioni degli
ultimi 3 anni solari

2014

Giuseppe Quartarone, Andrea Pietropolli Charmet, Lucio Ronchin, Claudio Tortato, Andrea Vavasori.

[Thermodynamics and kinetics of indole oligomerization in 0.5 mol L⁻¹ aqueous sulfuric acid: evaluation of some temperature dependant parameters](#)

JOURNAL OF PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY, 27; pp. 10

Articolo in rivista [Bib](#)

A. Pietropolli Charmet, P. Stoppa, N. Tasinato, S. Giorgianni, A. Gambi.

[IR spectra of 1-chloro-1-fluoroethene investigated by a combined experimental and computational study](#)

In: The 23rd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy.

Bologna, 2 settembre – 6 settembre 2014, Servizio Comunicazione e Relazioni Esterne | SNS , pp. 1, ISBN: 9781500560263

Abstract in Atti di convegno [Bib](#)

N. Tasinato; A. Turchetto; C. Puzzarini; P. Stoppa; A. Pietropolli Charmet; S. Giorgianni.

[Self-, N₂-, O₂-, and air-broadening coefficients of HFC-32 ro-vibrational- and rotational- transitions for atmospheric applications](#)

In: The 23rd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy.

Bologna , 2 settembre – 6 settembre 2014, Servizio Comunicazione e Relazioni Esterne | SNS, pp. 1, ISBN: 9781500560263

Abstract in Atti di convegno [Bib](#)

P. Stoppa; A. Baldacci; N. Tasinato; A. Pietropolli Charmet; S. Giorgianni; F. Tamassia; E. Cané; M. Villa.

[High-resolution infrared study of the v₄ and v₉ fundamental bands of CH₂35CIF](#)

In: The 23rd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy.

Bologna, 2 settembre – 6 settembre 2014, Servizio Comunicazione e Relazioni Esterne | SNS , pp. 1, ISBN: 9781500560263

Abstract in Atti di convegno [Bib](#)

A. Pietropolli Charmet; P. Stoppa; D. De Vito; N. Tasinato; S. Giorgianni; C. Puzzarini; I. Carnimeo; J. Bloino; M. Biczysko.

[A combined experimental and computational study on the vibrational spectra of 1-bromo-1-fluoroethene in the 200-6500 cm⁻¹ region](#)

In: The 23rd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy.

Bologna, 2 settembre – 6 settembre 2014, Servizio Comunicazione e Relazioni Esterne | SNS, pp. 1, ISBN: 9781500560263

Abstract in Atti di convegno [Bib](#)

N. Tasinato; D. Moro; P. Stoppa; A. Pietropolli Charmet; P. Toninello; S. Giorgianni.

[Investigation of Halon 1113 adsorbed on TiO₂ by coupling DRIFT spectroscopy and DFT periodic simulations](#)

In: The 23rd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy.

Bologna, 2 settembre – 6 settembre 2014, Servizio Comunicazione e Relazioni Esterne | SNS, pp. 1, ISBN: 9781500560263

Abstract in Atti di convegno [Bib](#)

N. Tasinato; G. Ceselin; G. Saran; P. Stoppa; A. Pietropolli Charmet; S. Giorgianni.

[Integrated experimental and computational vibrational spectroscopy of HFC-152A](#)

In: The 23rd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy.

Bologna, 2 settembre – 6 settembre 2014, Servizio Comunicazione e Relazioni Esterne | SNS , pp. 1, ISBN: 9781500560263

Abstract in Atti di convegno [Bib](#)

A. Pietropolli Charmet; P. Stoppa; N. Tasinato; S. Giorgianni.

[A joint experimental and computational study on the vibrational spectra of R1122](#)

In: The 23rd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy.

Bologna, 2 settembre – 6 settembre 2014, Servizio Comunicazione e Relazioni Esterne | SNS , pp. 1, ISBN: 9781500560263

Abstract in Atti di convegno [Bib](#)

N. Tasinato; A. Turchetto; C. Puzzarini; P. Stoppa; A. Pietropolli Charmet; S. Giorgianni.

[Self-, N₂-, O₂-broadening coefficients and line parameters of HFC-32 for v₇ band- and ground state- transitions from infrared and microwave spectroscopy](#)

MOLECULAR PHYSICS, 112; pp. 13

Articolo in rivista [Bib](#)

N. Tasinato; A. Pietropolli Charmet; P. Stoppa; S. Giorgianni; G. Buffa.

N₂⁻, O₂⁻ and He⁻ collision-induced broadening of sulphur dioxide ro-vibrational lines in the 9.2 micron atmospheric window
SPECTROCHIMICA ACTA. PART A, MOLECULAR AND BIOMOLECULAR SPECTROSCOPY, 118; pp. 7

Articolo in rivista 

P. Stoppa; N. Tasinato; A. Baldacci; A. Pietropolli Charmet; S. Giorgianni; R. Wugt Larsen.

High-resolution infrared spectroscopy of CH₂BrF near 8 μm: rovibrational analysis of the ν₃ and ν₈ fundamentals and resonances with the dark states 2ν₅ and ν₆ + ν₉
MOLECULAR PHYSICS, 112; pp. 9

Articolo in rivista 

E. Canè; M. Villa; R. Tarroni; F. Tamassia; A. Pietropolli Charmet; N. Tasinato, P. Stoppa; S. Giorgianni.

The ro-vibrational analysis of the ν₄ fundamental band of CF₃Br from jet-cooled diode laser and FTIR spectra in the 8.3-μm region

MOLECULAR PHYSICS, 112; pp. 11

Articolo in rivista 

2013

J. Scaranto, D. Moro, N. Tasinato, P. Stoppa, A. Pietropolli Charmet, S. Giorgianni.
Investigation of CHBrF₂ adsorbed on TiO₂ through IR spectroscopy and DFT calculations

VIBRATIONAL SPECTROSCOPY, 65; pp. 5

Articolo in rivista 

P. Stoppa, A. Baldacci, A. Pietropolli Charmet, N. Tasinato, S. Giorgianni, E. Cané, G. Nivellini.

High resolution FTIR spectroscopy of chlorofluoromethane near 13 micron: rovibrational analysis and resonances of ν₅ and 2ν₆ bands in CH₂35ClF and CH₂37ClF

MOLECULAR PHYSICS, 111; pp. 10

Articolo in rivista 

N. Tasinato, A. Pietropolli Charmet, P. Stoppa, G. Buffa, C. Puzzarini.

A complete listing of sulfur dioxide self-broadening coefficients for atmospheric applications by coupling infrared and microwave spectroscopy to semiclassical calculations

JOURNAL OF QUANTITATIVE SPECTROSCOPY & RADIATIVE TRANSFER, 130; pp. 16

Articolo in rivista 

A. PIETROPOLLI CHARMET; P. STOPPA; N. TASINATO, S. GIORGIANNI, V. BARONE; M. BICZYSKO; J. BLOINO; C. CAPPELLI; I. CARNIMEO; C. PUZZARINI.

An integrated experimental and quantum-chemical investigation on the vibrational spectra of chlorofluoromethane

THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 139;

Articolo in rivista 

I. Carnimeo, C. Puzzarini, N. Tasinato, P. Stoppa, A. Pietropolli Charmet, M. Biczysko, C. Cappelli, V. Barone.

Anharmonic theoretical simulation of infrared spectra of halogenated organic compounds

THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 139; pp. 16

Articolo in rivista 

A. PIETROPOLLI CHARMET; G. QUARTARONE; L. RONCHIN; C. TORTATO; A. VAVASORI.

Quantum Chemical Investigation on Indole: Vibrational Force Field and Theoretical Determination of Its Aqueous pK_a Value

JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A, MOLECULES, SPECTROSCOPY, KINETICS, ENVIRONMENT, & GENERAL THEORY, 117;

Articolo in rivista 

N. Tasinato, A. Turchetto, P. Stoppa, A. Pietropolli Charmet, S. Giorgianni.

Line-by-line parameters of self- and foreign-broadened CH₂F₂ ro-vibrational transitions in the 8.3 micron region and the dissociation energy of (CH₂F₂)₂

In: The Twenty-third Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy.

Budapest - Hungary, 25-30 Agosto 2013, K. Zajacz, A. G. Csaszar , pp. 1, ISBN: 9789630872485

Abstract in Atti di convegno 

N. Tasinato, A. Pietropolli Charmet, P. Stoppa, G. Buffa, C. Puzzarini.

From the Quantum Number Dependence to a Complete Listing of Sulfur Dioxide Self

[Broadening Coefficients for Atmospheric Applications by Coupling Infrared and Microwave Spectroscopy to Semiclassical Calculations](#)

In: The Twenty-third Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy. Budapest - Hungary, 25-30 Agosto 2013, K. Zajacz, A. G. Csaszar, pp. 1, ISBN: 9789630872485

Abstract in Atti di convegno [Bib](#)

P. Stoppa, R. Visinoni, A. Baldacci, N. Tasinato, A. Pietropolli Charmet, S. Giorgianni, F. Kollipost, R. Wugt Larsen.

[High resolution infrared study of CH₂BrF in the range 920 – 1370 cm⁻¹: rovibrational analysis and resonances of ν₃, ν₄, ν₈, ν₉ fundamentals and ν₅+ν₆ combination band](#)

In: The Twenty-third Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy. Budapest - Hungary, 25-30 Agosto 2013, K. Zajacz, A. G. Csaszar, pp. 1, ISBN: 9789630872485

Abstract in Atti di convegno [Bib](#)

D. Moro, N. Tasinato, P. Stoppa, P. Toninello, A. Pietropolli Charmet, S. Giorgianni.

[The adsorption of chlorotrifluoroethene on titanium dioxide surface studied by DRIFT spectroscopy and periodic ab initio calculations](#)

In: The Twenty-third Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy. Budapest - Hungary, 25-30 Agosto 2013, K. Zajacz, A. G. Csaszar, pp. 1, ISBN: 9789630872485

Abstract in Atti di convegno [Bib](#)

2012

N. Tasinato, G. Regini, P. Stoppa, A. Pietropolli Charmet, A. Gambi.

[Anharmonic force field and vibrational dynamics of CH₂F₂ up to 5000 cm⁻¹ studied by Fourier transform infrared spectroscopy and state-of-the-art ab initio calculations](#)

THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 136; pp. 17

Articolo in rivista [Bib](#)

N. Tasinato, P. Stoppa, A. Pietropolli Charmet, S. Giorgianni, A. Gambi.

[Modelling the anharmonic and Coriolis resonances within the six level polyad involving the ν₄ fundamental in the ro-vibrational spectrum of vinyl fluoride](#)

JOURNAL OF QUANTITATIVE SPECTROSCOPY & RADIATIVE TRANSFER, 113; pp. 10

Articolo in rivista [Bib](#)

N. Tasinato, A. Pietropolli Charmet, P. Stoppa, S. Giorgianni, A. Gambi.

[Quantum-chemical ab initio investigation of the vibrational spectrum of halon 1113 and its anharmonic force field: A joint experimental and computational approach](#)

CHEMICAL PHYSICS, 397; pp. 10

Articolo in rivista [Bib](#)

Andrea Pietropolli Charmet.

[Quantum mechanical modelling of the vibrational force field of the greenhouse gas CFC-113](#)

SCIENCES AT CÀ FOSCARI, 1;

Articolo in rivista [Bib](#)

N. Tasinato, A. Pietropolli Charmet, P. Stoppa, G. Buffa.

[Experimental and theoretical broadening coefficients of self-perturbed SO₂ ro-vibrational transitions in the 9 micron atmospheric region from tunable diode laser spectroscopy and semiclassical calculations](#)

In: 22nd International conference on High Resolution Molecular Spectroscopy. Prague (Czech Republic), 4 - 8 settembre 2012, Published by the Institute of Chemical Technology, Prague ICT Prague Press, pp. 1, ISBN: 9788070808269

Abstract in Atti di convegno [Bib](#)

A. Pietropolli Charmet, P. Stoppa, N. Tasinato, S. Giorgianni, C. Puzzarini, M. Biczysko, J. Bloino, C. Cappelli, I. Carmineo.

[IR spectroscopy of HCFC-31 from the FAR up to the NIR region: a combined experimental and computational study](#)

In: 22nd International conference on High Resolution Molecular Spectroscopy. Prague (Czech Republic), 4 - 8 settembre 2012, Published by the Institute of Chemical Technology, Prague ICT Prague Press, pp. 1, ISBN: 9788070808269

Abstract in Atti di convegno [Bib](#)

N. Tasinato, A. Pietropolli Charmet, P. Stoppa, S. Giorgianni.

[He-, N₂- and O₂- broadening coefficients of sulfur dioxide rovibrational lines in the 9.2 micron region](#)

In: 22nd International conference on High Resolution Molecular Spectroscopy. Prague (Czech Republic), 4 - 8 settembre 2012, Published by the Institute of Chemical

Technology, Prague ICT Prague Press, pp. 1, ISBN: 9788070808269
 Abstract in Atti di convegno 

N. Tasinato, G. Regini, P. Stoppa, A. Pietropolli Charmet, A. Gambi.

[A joint experimental and computational study on the vibrational and ro-vibrational spectroscopy of HFC-32](#)

In: 22nd International conference on High Resolution Molecular Spectroscopy. Prague (Czech Republic), 4 - 8 settembre 2012, Published by the Institute of Chemical Technology, Prague ICT Prague Press, pp. 1, ISBN: 9788070808269

Abstract in Atti di convegno 

Elenco delle pubblicazioni in corso di stampa	Nessun documento
Altri prodotti scientifici	Dato non presente
Partecipazione a comitati editoriali di riviste/collane scientifiche	Dato non presente
Partecipazione come referee di progetti di ricerca nazionali ed internazionali	Dato non presente
Menzioni e premi ricevuti	Dato non presente
Relazioni invitate presso convegni o workshops	Dato non presente
Seminari su invito tenuti presso altre Università, Centri di Ricerca, Aziende,...	Dato non presente
Altre attività scientifiche: partecipazione a comitato scientifico di conferenze, peer-review di articoli sottomessi a riviste o convegni, etc.	E' stato membro del panel di esperti valutatori selezionati per il premio internazionale "Pliva Prize" assegnato durante il Congresso Internazionale "23° International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy" (2014). Nel periodo in esame ha eseguito il rapporto nella veste di referee per 12 lavori presentati per la pubblicazione presso le seguenti riviste internazionali: - Analytical Methods- ChemComm- Journal of Raman Spectroscopy- New Journal of Chemistry- RSC Advances- Journal of Material Chemistry A - Journal of Molecular Structure - PCCP.
Contratti di Ricerca e Finanziamenti esterni del triennio	Spettroscopia infrarossa a media e ad alta risoluzione di molecole di importanza atmosferica e astrofisica

Attività Didattica: insegnamenti negli ultimi tre anni accademici	Anno accademico	Nome corso	Codice corso	Voto medio	Voto medio ponderato di facoltà
	2014	CHIMICA FISICA 1 E LABORATORIO	CT0040		
	2014	SPETTROCHIMICA E SISTEMI DI INTERESSE ATMOSFERICO	CM0431		
	2014	SPETTROSCOPIA DI BASE	CM0304		
	2013	CHIMICA FISICA 1 E LABORATORIO SPETTROCHIMICA E SISTEMI DI	CT0040	2,63/4	3,05/4

	2013	INTERESSE ATMOSFERICO	CM0431		
	2013	SPETTROSCOPIA DI BASE	CM0304		
	2012	SPETTROSCOPIA DI BASE	CM0304	/	/
	2012	CHIMICA FISICA 1 E LABORATORIO	CT0040	2,3/4	3,2/4
	2011	INTRODUZIONE AGLI AMBIENTI DI ACQUISIZIONE E ANALISI DATI	CT0152		
	2011	CHIMICA FISICA 1 E LABORATORIO	CT0040	2,9/4	3,1/4
	2011	CHIMICA FISICA 1 E LABORATORIO	CT0041	3,2/4	3,1/4
	2010	CHIMICA FISICA 1 E LABORATORIO	CT0040		
	2010	INTRODUZIONE AGLI AMBIENTI DI ACQUISIZIONE E ANALISI DATI	CT0152		
Altra attività didattica (attività integrativa, insegnamenti di master o dottorato, etc.)	Dato non presente				
Tesi di laurea seguite come relatore	Anno solare	n. Tesi triennali	n. Tesi magistrali	n. Tesi dottorato	
	2014	1	0	0	
Incarichi accademici e attività organizzative	Incarichi accademici/attività organizzative/partecipazione commissioni giudicatrici	Ateneo/Facoltà/Dipartimento/altri organi collegiali		Compiti istituzionali/cariche elettive/nomine dirette	
	membro della Commissione Edilizia di Dipartimento	Dipartimento (DSMN)		nomina diretta Dipartimento di afferenza	
	membro della Commissione Erasmus di Dipartimento	Dipartimento (DSMN)		nomina diretta Dipartimento di afferenza	
	docente referente CIS per area didattica Chimica Fisica	Dipartimento (DSMN)		nomina concordata con i colleghi DSMN	
Attività Professionali esterne	Dato non presente				
Altre informazioni	Oggetto	Periodo	Note		
	Correlatore di Tesi Triennali e Magistrali	2012/2014	Dato non presente		