PARTE A CURA DELLA U.O. DIDATTICA E SERVIZI AGLI STUDENTI

Principali informazioni sull'insegnamento	
Denominazione insegnamento	Simmetria Molecolare
Corso di studio	Scienze Chimiche
Classe di laurea	LM-54
Crediti formativi (CFU)	4
Obbligo di frequenza	Sì
Lingua di erogazione	italiano
Anno Accademico	2018/2019

Docente responsabile	
Nome e Cognome	Savino Longo
indirizzo mail	savino.longo@uniba.it
telefono	080-5442088

Dettaglio insegnamento	Ambito disciplinare	SSD	tipologia attività
	Chimica	CHIM/03	Attività caratterizzanti

Erogazione insegnamento	Anno di corso	Semestre
	1	1

Modalità erogazione	CFU lez	Ore lez	CFU lab	Ore lab	CFU eserc	Ore eserc	CFU eserc campo	Ore eserc campo
	2	16	0	0	2	30	0	0

Organizzazione della didattica	ore totali	ore insegnamento	ore studio individuale
	100	46	54

Calendario	Inizio attività didattiche	Fine attività didattiche

PARTE A CURA DEL DOCENTE

Syllabus	
Prerequisiti	Chimica Inorganica e basi di chimica fisica
Risultati di apprendimento attesi *(declinare rispetto ai Descrittori di Dublino) (si raccomanda che siano coerenti con i risultati di apprendimento del CdS, riportati nei quadri A4a, A4b e A4c della SUA, compreso i risultati di apprendimento trasversali)*	
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 di orbitali o legami.
Capacità di applicare conoscenza e comprensione	Determinare le simmetrie di diversi sottosistemi nell'ambito di sistemi inorganici complessi. Ottenere informazioni strutturali da spettri IR e Raman di sostanze inorganiche.
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	Saper estrarre le informazioni di impiego operativo per casi di studio da testi

apprendimento	formali e siti internet.

Programma	
Contenuti dell'insegnamento	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.
Metodi didattici	Lezioni frontali mediante impiego di lavagna tradizionale. Impiego di modelli molecolari magnetici. Gli studenti sono incoraggiati a realizzare disegni su base assonometrica della struttura tridimensionale di molecole ed orbitali.
Metodi di valutazione *(indicare almeno la tipologia scritto, orale, altro)*	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 *(per ogni risultato di apprendimento atteso su indicato, descrivere cosa ci si aspetta lo studente conosca o sia in grado di fare e a quale livello al fine di dimostrare che un risultato di apprendimento è stato raggiunto e a quale livello)*	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	