

SSD CHIM/03	CHIMICA Generale ed Inorganica II			
	<b>Prof. Alessandro De Giacomo</b>			
	Telefono: 080 5442104		e-mail: <a href="mailto:alessandro.degiacomo@uniba.it">alessandro.degiacomo@uniba.it</a>	
	Orario ricevimento: lunedì-mercoledì ore 16-17		Presso: Dipartimento di Chimica	
Attività	Lezioni frontali	Esercitazioni	Laboratorio	Totale
Crediti	<b>4</b>	<b>2</b>		<b>6</b>
Ore attività	<b>32</b>	<b>30</b>		<b>62</b>
Ore studio individuale	<b>68</b>	<b>20</b>		<b>88</b>
Pre-requisiti	Conoscenze di base della Chimica Generale			
Obiettivi di Base	Completa conoscenza della struttura molecolare e delle teorie di rappresentazione delle molecole.			
Obiettivi Formativi Disciplinari	Conoscenza e applicazioni delle teorie dell'orbitale molecolare, del legame di valenza a molecole e complessi.			
Contenuto	<ul style="list-style-type: none"> <li>• La teoria cinetica dei gas: derivazione e applicazione della funzione di distribuzione di Maxwell-Boltzmann, concetto di probabilità, valore più probabile e valore medio di una grandezza fisica.</li> <li>• L'atomo di idrogeno in meccanica classica: cenni storici e modello di Bohr e sviluppi successivi.</li> <li>• Le funzioni d'onda: proprietà matematiche delle funzioni d'onda, propagazione di un'onda, onda stazionaria, particella in una buca di potenziale mono-dimensionale infinita (in x), ortonormalità delle funzioni, energia dei livelli permessi, nodi delle funzioni, lunghezza d'onda, valori medi e più probabili di x, influenza della forma della buca, estensione alla buca bi-dimensionale.</li> <li>• L'atomo di idrogeno in meccanica quantistica: risoluzione dell'equazione di Schrödinger in coordinate polari (<math>r, \vartheta, \varphi</math>), espressione analitica della parte spaziale di una funzione d'onda, introduzione dei numeri quantici n, l e m in meccanica quantistica.</li> <li>• Gli orbitali atomici: funzioni di spin, gli atomi a più elettroni, hamiltoniano di un atomo pluri-elettronico, approssimazione degli elettroni indipendenti, campo auto-coerente (SCF), orbitali di Slater (STO), configurazione elettronica degli atomi a più elettroni, principio di Pauli, antisimmetria delle funzioni d'onda, determinante di Slater, ortogonalità delle funzioni d'onda ns e calcolo della ricopertura degli STO in alcuni stati di H</li> <li>• Il legame chimico: strutture di Lewis, metodo VSEPR e geometria molecolare, strutture risonanti</li> <li>• Teoria del legame di valenza: lo ione H<sub>2</sub><sup>+</sup> e la molecola H<sub>2</sub>, il metodo di Heitler-London o l'indistinguibilità degli elettroni, le forme ioniche nelle rappresentazioni, necessità e costruzione degli orbitali ibridi</li> <li>• Teoria degli orbitali molecolari: lo ione H<sub>2</sub><sup>+</sup> e la molecola H<sub>2</sub>, l'approssimazione LCAO, gli orbitali molecolari di legame e di antilegame, orbitali molecolari di simmetria <math>\sigma, \pi</math> e <math>\delta</math>.</li> <li>• Metodo di approssimazione: il metodo variazionale e il determinante secolare</li> <li>• Applicazioni delle teorie del legame di valenza e degli orbitali molecolari: descrizione di molecole poliatomiche e costruzione del diagramma energetico, combinazione lineare di orbitali di stessa simmetria (SALC), molecole diatomiche, triatomiche lineari, triatomiche piegate, tetraatomiche, pentatomiche (CO, OH-, BeH<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, BH<sub>3</sub>, BF<sub>3</sub>, CH<sub>4</sub>, NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>CO, CO<sub>3</sub><sup>=</sup>, SO<sub>2</sub>, PH<sub>5</sub>, ClF<sub>3</sub>, SO<sub>3</sub>, SO<sub>4</sub><sup>=</sup>, SO<sub>2</sub>F<sub>2</sub>, OSF<sub>4</sub>, XeF<sub>5</sub><sup>+</sup>, ...)</li> <li>• Applicazioni del metodo variazionale: ricerca della funzione d'onda che minimizza l'energia in un sistema atomico, calcolo dell'energia di stabilizzazione del legame <math>\pi</math> dovuta alla delocalizzazione in CO<sub>2</sub>, C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>, C<sub>6</sub>H<sub>6</sub></li> <li>• Teoria del legame nei complessi di coordinazione: composti di coordinazione, teoria elettrostatica del legame, teoria del legame di valenza (complessi ottaedrici (sp<sup>3</sup>d<sup>2</sup>, d<sup>2</sup>sp<sup>3</sup>), quadrati planari e tetraedrici), teoria del campo cristallino (complessi ottaedrici (basso spin, alto spin), quadrati planari e tetraedrici), distorsioni tetragonali della simmetria ottaedrica (teorema di Jahn-Teller), teoria degli orbitali molecolari (complessi ottaedrici (interazione <math>\pi</math> legante-metallo, retrodonazione <math>\pi</math>, influenza della natura del legante), complessi quadrati planari e tetraedrici), serie spettrochimica, molecole sandwich: il ferrocene (gli orbitali molecolari e il diagramma energetico), struttura dei metallo-</li> </ul>			
Testi consigliati	"Fondamenti di Chimica - Legame Chimico", M.Capitelli, R. Celiberto, C.Gorse, S. Longo, Ed. Adriatica, 2000; "Geometria molecolare: il modello VSEPR", R.J. Gillespie, I. Hargittai Ed.Zanichelli.			
Propedeuticità	<b>Obbligatorie</b> Chimica I		<b>Consigliate</b> nessuna	
Metodi di valutazione	<b>Prova scritta</b> <b>SI</b>		<b>Colloquio orale</b> <b>SI (integrato)</b>	
Collocazione	<b>Anno di Corso</b> <b>II</b>		<b>Semestre</b> <b>II</b>	