

CORSO DI STUDIO *Corso di Laurea Triennale in Chimica*

ANNO ACCADEMICO *2024-2025*

DENOMINAZIONE DELL'INSEGNAMENTO *Chimica Generale ed Inorganica II corso*

Principali informazioni sull'insegnamento	
Anno di corso	<i>Il anno</i>
Periodo di erogazione	<i>Il semestre (01-03-25-10-06-25)</i>
Crediti formativi universitari (CFU/ETCS):	5
SSD	<i>Chim03</i>
Lingua di erogazione	<i>Italiano</i>
Modalità di frequenza	<i>frequenza obbligatoria</i>

Docente	
Nome e cognome	<i>Alessandro De Giacomo</i>
Indirizzo mail	<i>alessandro.degiacomo@uniba.it</i>
Telefono	
Sede	<i>Stanza 320</i>
Sede virtuale	<i>Da definire</i>
Ricevimento	<i>Tutta la settimana previo appuntamento</i>

Organizzazione della didattica			
Ore			
Totali	Didattica frontale	Pratica (laboratorio, campo, esercitazione, altro)	Studio individuale
<i>Es. 55</i>	<i>55</i>	<i>15</i>	<i>90</i>
CFU/ETCS			
<i>Es. 5</i>	<i>4</i>	<i>1</i>	

Obiettivi formativi	Conoscenza e applicazioni delle teorie dell'orbitale molecolare, del legame di valenza a molecole e complessi di coordinazione.
Prerequisiti	Conoscenze di base della Chimica Generale I

<p>Metodi didattici</p>	<p><i>Le lezioni vengono effettuate in aula alla lavagna con l'ausilio di software e modelli molecolari e orbitalici. I principi teorici vengono applicati a diverse molecole e discussi apertamente con gli studenti. Il corso prevede anche una serie di esercitazioni per affrontare le prove d'esame.</i></p>
<p>Risultati di apprendimento previsti</p> <p><i>Da indicare per ciascun Descrittore di Dublino (DD=</i></p> <p>DD1 Conoscenza e capacità di comprensione</p> <p>DD2 Conoscenza e capacità di comprensione applicate</p> <p>DD3-5 Competenze trasversali</p>	<p><i>Alla fine del percorso formativo di questo corso, lo studente deve sapere come utilizzare la meccanica quantistica per l'interpretazione di atomi e molecole, descrivere molecole e complessi con la teoria dell'orbitale molecolare e interpretare la struttura elettronica di molecole e complessi di coordinazione. Lo studente deve inoltre individuare criticamente la teoria più adatta per l'interpretazione delle molecole per lo specifico campo d'interesse: geometria e simmetria, energia dei legami, interazione elettronica etc.</i></p> <p>- Descrittore di Dublino 1: conoscenza e capacità di comprensione (che cosa lo/la studente/studentessa conosce al termine dell'insegnamento);</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ Principi di meccanica quantistica ○ Struttura degli atomi ○ Teoria VB e OM per molecole poliatomiche ○ Teorie CC, VB, MO per i complessi di coordinazione. <p>- Descrittore di Dublino 2:</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ Applicare la meccanica quantistica alla struttura della materia ○ Descrivere molecole con MO e VB e ricavarne il diagramma energetico ○ Descrivere complessi di coordinazione e loro proprietà <p>- Descrittore di Dublino 3:</p>

	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Autonomia di giudizio</i> Al termine dell'insegnamento lo/la studente/studentessa dovrà essere in grado di <ul style="list-style-type: none"> ○ Scegliere la teoria più adatta per descrivere una specifica proprietà di molecole e complessi - Descrittore di Dublino 4: • <i>Abilità comunicative</i> Al termine dell'insegnamento lo/la studente/studentessa dovrà essere in grado di <ul style="list-style-type: none"> ○ Di trattare la struttura della materia con terminologia scientifica, - Descrittore di Dublino 5: <i>Capacità di apprendere in modo autonomo</i> Al termine dell'insegnamento lo/la studente/studentessa dovrà essere in grado di <ul style="list-style-type: none"> • Interpretare caratteristiche e proprietà delle molecole, incluso la reattività, e dei complessi sulla base della struttura e dell'energia ottenuta con VB e MO.
Contenuti di insegnamento (Programma)	<ul style="list-style-type: none"> • L'atomo di idrogeno in meccanica classica: cenni storici e modello di Bohr e sviluppi successivi. • 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. • L'atomo di idrogeno in meccanica quantistica: risoluzione dell'equazione di Schrödinger in coordinate polari (r, ϑ, φ), espressione analitica della parte spaziale di una funzione d'onda, introduzione dei numeri quantici n, l e m in meccanica quantistica. • 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 • Il legame chimico: strutture di Lewis, metodo VSEPR e geometria molecolare, strutture risonanti • Teoria del legame di valenza: lo ione H_2^+ e la molecola H_2, il metodo di Heitler-London o l'indistinguibilità degli elettroni, le forme ioniche nelle rappresentazioni, necessità e costruzione degli orbitali ibridi <ul style="list-style-type: none"> • Teoria degli orbitali molecolari: lo ione H_2^+ e la molecola H_2, l'approssimazione LCAO, gli orbitali molecolari di legame e di antilegame, orbitali molecolari di simmetria σ, π e δ. • Metodo di approssimazione: il metodo variazionale e il determinante secolare • 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,

	<p>triatomiche lineari, triatomiche piegate, tetratomiche, pentatomiche (CO, OH-, BeH₂, H₂O, BH₃, BF₃, CH₄, NH₃, H₂CO, CO₃⁼, SO₂, PH₅, ClF₃, SO₃, SO₄⁼, SO₂F₂, OSF₄, XeF₅⁺, ...)</p> <ul style="list-style-type: none"> • Applicazioni del metodo variazionale: ricerca della funzione d'onda che minimizza l'energia in un sistema atomico, calcolo dell'energia di stabilizzazione del legame π dovuta alla delocalizzazione in CO₂, C₄H₆, C₆H₆ • Teoria del legame nei complessi di coordinazione: composti di coordinazione, teoria elettrostatica del legame, teoria del legame di valenza (complessi ottaedrici (sp³d², d²sp³), 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 π legante-metallo, retrodonazione π, 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-carbonili, confronto tra teorie del campo cristallino e degli orbitali molecolari per complessi lineari, trigonali planari, a bipiramide trigonale, a piramide quadrata.
Testi di riferimento	"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.
Note ai testi di riferimento	<i>I testi saranno integrati con Presentazioni ppt e dispense.</i>
Materiali didattici	<i>Il materiale didattico verrà messo sul canale team del corso</i>

Valutazione	
Modalità di verifica dell'apprendimento	<i>La qualità dell'apprendimento sarà valutata con un esame scritto della durata di 3 ore in cui lo studente deve essere in grado di mostrare di essere in grado di descrivere molecole e complessi con VB e MO e di calcolare l'energia con il metodo variazionale.</i>

<p>Criteri di valutazione</p>	<p><i>Per ogni risultato di apprendimento atteso su indicato, descrivere cosa ci si aspetta lo/la studente/studentessa 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 (a titolo di esempio: capacità di organizzare discorsivamente la conoscenza; capacità di ragionamento critico sullo studio realizzato; qualità dell'esposizione, competenza nell'impiego del lessico specialistico, efficacia, linearità etc.).</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Conoscenza e capacità di comprensione:</i> o Funzionamento chimica quantistica • <i>Conoscenza e capacità di comprensione applicate:</i> o Applicare teorie OM, VB etc a molecole e complessi di ogni tipo. • <i>Autonomia di giudizio:</i> o individuare metodologie più adatte per lo studio di molecole e complessi. • <i>Abilità comunicative:</i> o Utilizzo di formalismo scientifico. • <i>Capacità di apprendere:</i> o Risolvere strutture e diagrammi energetici di molecole inorganiche.
<p>Criteri di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale</p>	<p><i>Il voto finale è attribuito in trentesimi. L'esame si intende superato quando il voto è maggiore o uguale a 18. Il requisito minimo è aver svolto l'esercizio relativo alla molecola e quello relativo al complesso.</i></p>

FAC.SIMILE SCHEDA DI INSEGNAMENTO IN LINGUA INGLESE
COURSE OF STUDY
ACADEMIC YEAR
ACADEMIC SUBJECT

General information	
Year of the course	
Academic calendar (starting and ending date)	
Credits (CFU/ETCS):	
SSD	
Language	
Mode of attendance	

Professor/ Lecturer	
Name and Surname	
E-mail	
Telephone	
Department and address	
Virtual room	
Office Hours (and modalities: e.g., by appointment, on line, etc.)	

Work schedule			
Hours			
Total	Lectures	Hands-on (laboratory, workshops, working groups, seminars, field trips)	Out-of-class study hours/ Self-study hours
<i>Es. 150</i>	<i>32</i>	<i>28</i>	<i>90</i>
CFU/ETCS			
<i>Es. 6</i>	<i>4</i>	<i>2</i>	

Learning Objectives	
Course prerequisites	

Teaching strategie	
Expected learning outcomes in terms of	
Knowledge and understanding on:	<input type="radio"/> xxxxxxxxxxxx <input type="radio"/> xxxxxxxxxxxx <input type="radio"/> xxxxx <input type="radio"/> xxxxxxxx
Applying knowledge and understanding on:	<input type="radio"/> xxxxxxxxxxxx <input type="radio"/> xxxxxxxxxxxx <input type="radio"/> xxxxxxxxxxxx
Soft skills	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Making informed judgments and choices</i> ○ xxxxxxxxxxxx

	<ul style="list-style-type: none"> ○ XXXXXXXXX ○ XXXXXXXXXXXXX ○ XXXXXXXXX ● <i>Communicating knowledge and understanding</i> ○ XXXXXXXXXXXXXXXX, ○ XXXXXXXXXXXXXXXX ● <i>Capacities to continue learning</i> ○ XXXXXXXXX.
Syllabus	
Content knowledge	
Texts and readings	
Notes, additional materials	
Repository	

Assessment	
Assessment methods	
Assessment criteria	<ul style="list-style-type: none"> ● <i>Knowledge and understanding</i> ○ xxxx ● <i>Applying knowledge and understanding</i> ○ xxxxx ● <i>Autonomy of judgment</i> ○ xxxx ● <i>Communicating knowledge and understanding</i> ○ XXXXXXXXXXXXXXXX ● <i>Communication skills</i> ○ XXXXXXXXXXXXXXXX ● <i>Capacities to continue learning</i> ○
Final exam and grading criteria	
Further information	
	.