

SSD CHIM/03	CHIMICA Generale ed Inorganica II			
	Prof. Alessandro De Giacomo			
	Telefono: 080 5442104		e-mail: alessandro.degiacomo@uniba.it	
	Orario ricevimento: lunedì-mercoledì ore 16-17		Presso: Dipartimento di Chimica	
Attività	Lezioni frontali	Esercitazioni	Laboratorio	Totale
Crediti	4	2		6
Ore attività	32	30		62
Ore studio individuale	68	20		88
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"> • 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. • 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 • 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, triatomiche lineari, triatomiche piegate, tetraatomiche, pentatomiche ($CO, OH^-, BeH_2, H_2O, BH_3, BF_3, CH_4, NH_3, H_2CO, CO_3^{2-}, SO_2, PH_5, ClF_3, SO_3, SO_4^{2-}, SO_2F_2, OSF_4, XeF_5^+, \dots$) • 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 CO_2, C_4H_6, C_6H_6 • Teoria del legame nei complessi di coordinazione: composti di coordinazione, teoria elettrostatica del legame, teoria del legame di valenza (complessi ottaedrici (sp^3d^2, d^2sp^3), 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 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	Obbligatorie Chimica I		Consigliate nessuna	
Metodi di valutazione	Prova scritta SI		Colloquio orale SI (integrato)	
Collocazione	Anno di Corso II		Semestre II	