

FACOLTÀ	Scienze MM. FF. NN.
ANNO ACCADEMICO	2014-15
CORSO DI LAUREA	Scienze Fisiche
INSEGNAMENTO	Chimica II
TIPO DI ATTIVITÀ	Affine
AMBITO DISCIPLINARE	Attività formative affini o integrative
CODICE INSEGNAMENTO	14033
ARTICOLAZIONE IN MODULI	NO
NUMERO MODULI	-
SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI	CHIM/03
DOCENTE RESPONSABILE	Antonino Martorana Professore Ordinario Università di Palermo
CFU	4 lezioni frontali 2 esercitazioni
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	94
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE	56
PROPEDEUTICITÀ	Nessuna
ANNO DI CORSO	3
SEDE DI SVOLGIMENTO DELLE LEZIONI	Aula D, DSFA, via Archirafi 36
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali, Esercitazioni in aula, Esercitazioni numeriche
MODALITÀ DI FREQUENZA	Facoltativa
METODI DI VALUTAZIONE	Prova Orale
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
PERIODO DELLE LEZIONI	Secondo semestre
CALENDARIO DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE	Secondo il calendario del corso di laurea
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	Tutti i giorni, su appuntamento antonino.martorana@unipa.it

RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Conoscenza e capacità di comprensione

Nel settore della chimica, con specifico riguardo per la capacità di comprendere problematiche e temi relativi all'analisi del legame chimico

Capacità di applicare conoscenza e comprensione

All'analisi delle proprietà della materia che dipendono dalla struttura elettronica

Autonomia di giudizio

Nell'interpretazione di dati relativi a struttura di molecole e tipo di legame chimico, che consenta di trarre conclusioni sulle correlazioni tra struttura elettronica e proprietà quali reattività, proprietà fisiche, dati spettroscopici

Abilità comunicative

Di dati sulla struttura elettronica di atomi e molecole che consenta una buona interlocuzione con specialisti e non specialisti

Capacità d'apprendimento

Nello studio di testi scientifici che trattino di correlazioni struttura elettronica-proprietà di atomi e molecole e che consenta di intraprendere studi di livello superiore

OBIETTIVI FORMATIVI DEL CORSO

Analisi della simmetria e interpretazione del legame chimico e delle proprietà di semplici molecole in base alla loro struttura elettronica.

ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
1	Introduzione al corso
1	Richiami e analisi critica su: legame chimico secondo il modello di Lewis e forma delle molecole secondo il modello VSEPR.
4	Soluzione dell'eq. di Schroedinger per un atomo idrogenoide. Orbitali atomici s,p,d. Il principio variazionale. Unità atomiche. Atomi a più elettroni. Aufbau. Principio di Pauli. Regole di Hund. Livelli di energia negli atomi a più elettroni. Tavola periodica e proprietà legate alla periodicità. Energia di ionizzazione, affinità elettronica. Raggio atomico, ionico, covalente.
9	Operazioni di simmetria. Gruppi punto. Simmetria delle molecole, determinazione del gruppo di simmetria di una molecola. Rappresentazioni irriducibili. Carattere dei gruppi. Teoremi di ortogonalità.
7	Funzioni spin-orbitali. Equazione di Schroedinger per gli atomi a più elettroni, determinante di Slater. Correlazione di elettroni in un sistema polielettronico. Valore di aspettazione dell'energia per un determinante di Slater. Integrale di Coulomb e di scambio. Calcoli di struttura elettronica restricted e unrestricted, closed shell e open shell.
4	Autospazi di Hamiltoniano e rappresentazioni irriducibili del gruppo di simmetria di una molecola. Degenerazione normale e accidentale. L'approssimazione LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals). Operatori di proiezione. SALC (Symmetry Adapted Linear Combination of atomic orbitals).
6	Struttura elettronica delle molecole biatomiche omonucleari del I e II periodo. Orbitali molecolari di legame, antilegame e non legame. Ordine di legame. Legami sigma e pi greco. Analisi della struttura elettronica e delle proprietà di piccole molecole poliatomiche. Orbitali HOMO e LUMO.
	ESERCITAZIONI
6	Esercizi su simmetrie e determinazione del gruppo di simmetria delle molecole
4	Analisi di Mulliken della popolazione elettronica
14	Esercitazioni numeriche in aula informatica in cui vengono costruite e analizzate dal punto di vista della struttura elettronica: Molecole diatomiche omonucleari del secondo periodo CO e N ₂ LiF, HF (confronto di carattere ionico del legame) HF, HCl (confronto di acidità) H ₂ O Lo ione molecolare FHF ⁻ , l'interazione HF-Hf, l'interazione H ₂ O-H ₂ O per un'analisi del legame a idrogeno. Semplici molecole organiche (etene, etano, etino, benzene)
TESTI CONSIGLIATI	Group theory and chemistry, D.M.Bishop, Clarendon Press, 1973 Modern quantum chemistry, A. Szabo, N.S. Ostlund, McGraw-Hill, 1989 Inorganic Chemistry. G. L Miessler, D. A. Tarr, Prentice Hall, 2003.