

Obiettivi	ITALIANO	Obiettivo del corso è approfondire la conoscenza del legame chimico in molecole, complessi e solidi con gli strumenti della quantomeccanica.
	INGLESE	
Programma	ITALIANO	<ul style="list-style-type: none"> <li>• L'atomo di Bohr e i principi di quantizzazione.</li> <li>• L'atomo di Sommerfeld e i numeri quantici secondari.</li> <li>• Definizione dell'equazione agli autovalori.</li> <li>• Rappresentazioni quantomeccaniche.</li> <li>• Proprietà degli operatori: linearità e calcolo del commutatore.</li> <li>• Costruzione degli operatori.</li> <li>• Postulati di quantomeccanica.</li> <li>• La particella nella scatola.</li> <li>• L'equazione di Schroedinger per gli atomi idrogenoidi: soluzione in coordinate polari e</li> <li>• Atomi polielettronici e costanti di schermo.</li> <li>• Numero quantico J. Accoppiamento j-j.</li> <li>• Simboli di termine atomici.</li> <li>• Teorema variazionale.</li> <li>• Teoria della banda di valenza.</li> <li>• Orbitali Molecolari (OM) con il metodo LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals): calcolo dei coefficienti di combinazione lineare per molecole omo- ed eteronucleari.</li> <li>• Metodi OM e VB per molecole biatomiche omonucleari ed eteronucleari.</li> <li>• Calcolo dei coefficienti di combinazione di orbitali ibridi</li> <li>• Simboli di termine Molecolari</li> <li>• Molecole poliatomiche: BeH<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, BF<sub>3</sub>, NH<sub>3</sub>, CH<sub>4</sub>, NO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O.</li> <li>• Teoria dei gruppi: elementi di simmetria, gruppi puntuali, rappresentazioni irriducibili e riducibili.</li> <li>• Complessi di coordinazione: descrizione dei numeri di coordinazione più comuni, nomenclatura, chiralità e assegnazione della configurazione assoluta di complessi ottaedrici chelati.</li> <li>• Teoria del campo cristallino, degli OM e VB applicata a complessi ottaedrici, tetraedrici e quadrato-piani,</li> <li>• Complessi ottaedrici ad alto e basso spin.</li> <li>• Legami <math>\sigma</math> e <math>\pi</math> nei complessi ottaedrici, serie spettrochimica.</li> <li>• Parametri di Racah.</li> <li>• Simboli di termine Spettroscopici.</li> <li>• Regole di selezione nelle transizioni d-d.</li> <li>• Transizione LMCT, MLCT.</li> <li>• Solidi Ionici e Metallici, fattore di impaccamento</li> <li>• Costante di Madelung in solidi ionici,</li> <li>• Difetti stechiometrici e non stechiometrici</li> </ul>

		<ul style="list-style-type: none"> <li>• Legami metallici, teoria dell'elettrone quasi libero,</li> <li>• Teoria delle bande.</li> <li>• Tight binding</li> </ul>
	<p>INGLESE</p>	<p>Bohr Atom and Quantization Principles</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Sommerfeld Atom and Secondary Quantum Numbers</li> <li>• Eigenvalues Equations</li> <li>• Quantum Mechanical Representations</li> <li>• Operator Properties: Lineary and distribution Properties</li> <li>• Calculation of the Commutator</li> <li>• Operators building up</li> <li>• Quantum Mechanics Postulates</li> <li>• The particle in the box</li> <li>• Schroedinger Equation for hydrogenoid atoms and solution in polar coordinates: Deduction of the Quantum numbers</li> <li>• Poly-electrons Atoms and Shielding constants</li> <li>• J quantum number. j-j coupling.</li> <li>• Atomic Term Symbols</li> <li>• Variational Theorem</li> <li>• Valence Band Theory</li> <li>• Molecular Orbitals (MO) by Linear Combination of Atomic Orbitals (LCAO): calculation of combination coefficient for Homo- and Hetero- nuclear biatomic molecules.</li> <li>• Description of Homo- and Hetero- nuclear biatomic molecules by VB and MO.</li> <li>• Molecular Term Symbols</li> <li>• Calculation of mixing coefficients in Hybrid Orbitals</li> <li>• Polyatomic Molecules by VB and MO: BeH<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, BF<sub>3</sub>, NH<sub>3</sub>, CH<sub>4</sub>, NO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O.</li> <li>• Calculation of Direct Overlap Degree.</li> <li>• Group Theory: Definition of Symmetry elements, point groups, irreducible and reducible representations and their mutual relationship.</li> <li>• Coordination Complexes: description of the most common coordination numbers, nomenclature, chirality and as assignment of the absolute configuration to octahedral complexes.</li> <li>• Crystal Field Theory, VB and MO theory applied to octahedral, tetrahedral and square-planar complexes.</li> <li>• High and low spin complexes</li> <li>• <math>\sigma</math> e <math>\pi</math> bonds in octahedral complexes and the spectro-chemical series.</li> <li>• Racah Parameters.</li> <li>• Spectroscopic Term Symbols.</li> <li>• Selection Rules in d-d transitions</li> <li>• Ligand Metal Charge Transfer, Metal Ligand Charge Transfer transitions.</li> <li>• Solids: packing factor, symmetries in solids</li> <li>• Ionic solids: Madelung constant,</li> <li>• Stoichiometric and non-Stoichiometric defects</li> </ul>

		<ul style="list-style-type: none"> <li>• Metallic bonds: almost-free electron theory</li> <li>• Band Theory</li> <li>• Tight Binding</li> </ul>
Denominazione	ITALIANO	CHIMICA INORGANICA 2
	INGLESE	Inorganic Chemistry II
Testi adottati		
Valutazione	Prova scritta	
	Prova orale X	
	Test attitudinale	
	Valutazione progetto	
	Valutazione tirocinio	
	Valutazione in itinere	
Prova pratica		