



### Docente responsabile dell'insegnamento/attività formativa

Nome

Cognome

### Denominazione insegnamento/attività formativa

Italiano

Inglese

### Informazioni insegnamento/attività formativa

A.A.

CdS

Codice

Canale

CFU

### Obiettivi formativi e risultati di apprendimento attesi

Italiano

**OBIETTIVI FORMATIVI:** Approfondimento della conoscenza del legame chimico in molecole, complessi e solidi con gli strumenti della quantomeccanica.

**CONOSCENZA E CAPACITÀ DI COMPrensIONE:** familiarità con il linguaggio quantomeccanico come base della descrizione del legame chimico.

**CAPACITÀ DI APPLICARE CONOSCENZA E COMPrensIONE:** al termine del corso gli studenti dovranno essere capaci di correlare proprietà elettroniche delle molecole alle loro caratteristiche macroscopiche come il colore e alle proprietà spettroscopiche. Dovranno, inoltre, essere in grado prevedere l'andamento del percorso reattivo in reazioni di sostituzione e valutare strategie di sostituzione.

**AUTONOMIA DI GIUDIZIO:** si configura come capacità di valutazione autonoma delle proprie conoscenze. Da un punto di vista pratico dell'apprendimento, gli studenti dovranno essere in grado di distinguere autonomamente quali scenari chimici siano plausibili e quali siano i limiti delle varie trattazioni.



Inglese

**LEARNING OUTCOMES:** Knowledge of the chemical bonds in molecules, complexes and solids through a quanto-mechanical description

**KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING:** becoming conversant with the quanto-mechanical language as foundation of the chemical bond

**APPLYING KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING:** it is expected to be capable of correlating the electronic properties of molecules, with their macroscopic characteristics, such as the color, and their spectroscopic properties. Along with this, it is foreseen to forecast the reaction pathway in substitution reactions, and to be capable of evaluating strategies of substitutions.

**MAKING JUDGEMENTS:** capability of self-evaluation of the acquired knowledge. On the practical side, the students are supposed to independently sort out which chemical scenarios are plausible as well the limits are of the different approaches.

**COMMUNICATION SKILLS:** they are related to the capability of describing and evaluating

### Prerequisiti

Italiano

Conoscenza delle basi di matematica e fisica, della chimica generale, e della chimica sistematica.

Inglese

Basic knowledge of mathematics and physics, general and systematic chemistry.

### Programma

Italiano

L'atomo di Bohr e i principi di quantizzazione. Definizione dell'equazione agli autovalori e rappresentazioni quantomeccaniche. Postulati di quantomeccanica. La particella nella scatola. Soluzioni dell'equazione di Schroedinger per l'atomo di idrogeno e estensione agli atomi a molti elettroni. Costanti di schermo. Simboli di termine atomici. Teoria del legame di valenza. Orbitali Molecolari (OM) con il metodo LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals): calcolo dei coefficienti di combinazione lineare per molecole omo- ed eteronucleari. Calcolo dei coefficienti di combinazione di orbitali ibridi. 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. Teoria dei gruppi: elementi di simmetria, gruppi puntuali, rappresentazioni irriducibili e riducibili. Complessi di coordinazione: descrizione dei numeri di coordinazione più comuni, nomenclatura, chiralità e assegnazione della configurazione assoluta di complessi ottaedrici chelati. Stabilità dei complessi ed effetto della chelazione Teoria del campo cristallino, degli OM e VB applicata



# Università degli Studi di Roma "Tor Vergata"

## Scheda Insegnamento/Attività Formativa

Inglese

Bohr Atom and Quantization Principles. Eigenvalues Equations and quantum Mechanical Representations. The postulates of quantum mechanics. The particle in the box. Solutions of the Schroedinger equation for hydrogenoid atoms and poly-electrons atoms . Shielding constants. Atomic Term Symbols. Valence Band Theory. Molecular Orbitals (MO) by Linear Combination of Atomic Orbitals (LCAO): calculation of combination coefficient for Homo- and Hetero- nuclear biatomic molecules. Description of Homo- and Hetero- nuclear biatomic molecules by VB and MO. Molecular Term Symbols. Calculation of mixing coefficients in Hybrid Orbitals. 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. Group Theory: Definition of Symmetry elements, point groups, irreducible and reducible representations and their mutual relationship. Coordination Complexes: description of the most common coordination numbers, nomenclature, chirality and as assignment of the absolute configuration to octahedral complexes. Stabilità dei

### Modalità di svolgimento

- Modalità in presenza  
 Modalità a distanza

### Descrizione della modalità di svolgimento e metodi didattici adottati

Italiano

Le lezioni frontali prevedono la partecipazione attiva da parte degli studenti e la verifica sistematica, mediante colloquio informale di gruppo, della comprensione dei concetti sviluppati per stimolare l'autovalutazione.

Inglese

The classes foresee the active participation of the students and a constant verification of the acquired knowledge and the familiarity with new chemical concepts through informal group talks, in order to stimulate the self-evaluation

### Modalità di frequenza

- Frequenza obbligatoria  
 Frequenza facoltativa



### Descrizione della modalità di frequenza

Italiano

Aperta a iscritti e ospiti

Inglese

Open

### Modalità di valutazione

- Prova scritta
- Prova orale
- Valutazione in itinere
- Valutazione di progetto
- Valutazione di tirocinio
- Prova pratica
- Prova di laboratorio

### Descrizione delle modalità e dei criteri di verifica dell'apprendimento

Italiano

La verifica dell' apprendimento viene valutata attraverso un colloquio orale e pubblico in cui si richiede di dimostrare di aver acquisito i concetti fondamentali, di avere capacità di collegamento tra di loro i vari aspetti e di valutazione dell' impatto di un elemento in più contesti.



# Università degli Studi di Roma "Tor Vergata"

## Scheda Insegnamento/Attività Formativa

Inglese

The final test is an oral, public exam, where the knowledge of the fundamental concepts is probed, as well as the connection capability of different concepts and the impact of the same element in different contexts.

### Testi adottati

Italiano

Chimica Inorganica Atkins, chimica inorganica Huheey

Inglese

Chimica Inorganica Atkins, chimica inorganica Huheey

### Bibliografia di riferimento

Italiano

Molecular orbital theory Ballhausen-Grey

Inglese

Molecular orbital theory Ballhausen-Grey



Università degli Studi di Roma "Tor Vergata"

Scheda Insegnamento/Attività Formativa

Altre informazioni

Italiano

--

Inglese

--