

Programma di CHIMICA  
Per C.L. Fisica Triennale  
6 cfu. Docente: Prof. Savino Longo

Definizioni: materia, sostanza. Peso atomico. Densità. Stima del raggio atomico: Fe-alfa (bcc), spiegazione struttura bcc, applicazione ai composti: FeNi. Introduzione alla stechiometria. Ioni e raggio ionico. Struttura CsCl. Descrizione a strati e "in prospettiva" delle strutture NaCl e CsCl. Formule per la determinazione di lunghezze ed angoli dalle coordinate. Regola del rapporto dei raggi ionici, spiegazione dei valori limite  $\sqrt{3}-1$  e  $\sqrt{2}-1$ . Calcolo della densità di CsCl e NaCl. Struttura fcc. Raggio di Au dalla densità del metallo. Transizione Fe(alpha)-Fe(gamma). Misura e significato delle energie di ionizzazione con analisi dei dati tabulati. Elettroni di valenza. Gruppo a cui appartiene un elemento. Derivazione della equazione di Schroedinger dalla equazione d'onda stazionaria. Modi di oscillazione di una corda, di una membrana e modi degeneri. Atomo come buca di potenziale. Equazione d'onda per H. Orbitali s e p. Equazione d'onda per He. Approssimazione degli orbitali. Configurazione elettronica. Livelli di energia. Esercizi ed Introduzione al legame covalente: hamiltoniana per H<sub>2</sub><sup>+</sup>. Orbitali atomici sigma<sub>g</sub> e sigma<sub>u</sub>. Calcolo del valore medio dell'energia e descrizione delle curve E(d) per i due casi. Configurazione di H<sub>2</sub><sup>+</sup>, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub><sup>-</sup>, He<sub>2</sub>, He<sub>2</sub><sup>+</sup>, determinazione qualitativa delle energie di legame. Hamiltoniana e funzione d'onda quantistica per H<sub>2</sub>. Relazione tra tetraedro e cubo: calcolo dell'angolo tetraedrico. Geometria di CH<sub>4</sub>. Calcolo dei coefficienti degli orbitali ibridi sp<sup>2</sup> e sp<sup>3</sup>. Discussione del legame in CH<sub>4</sub> usando sp<sup>3</sup>. Introduzione al metodo VSEPR per n=4 con esempio di H<sub>2</sub>O e NH<sub>3</sub>. C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>. Barriera alla rotazione. Isomeri. Discussione di strutture AX<sub>n</sub>Em. Strutture basate sull'ottaedro e sulla bipiramide trigonale. Regole per il posizionamento dei doppietti. Applicazione del concetto di risonanza. Esempi: CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>, benzene, naftalene. Correlazione tra risonanza e conduzione elettrica. Correzione per legami doppi e di ordine parziale. Struttura del diamante (relazione con il cubo, coordinate nucleari, uso dei raggi covalenti, densità). Solidi con la struttura del diamante (Grimm-Sommerfeld). Struttura della grafite, ordine di legame e distanza C-C. Definizione di entalpia di reazione e formazione. Riferimento del DHf agli elementi. Possibili applicazioni. Esempi di calcolo del DH di combustione. Analisi ed esempi di uso di una tavola di DHf. Bilanciamento di reazioni, previsione di prodotti, calcolo della DH di reazione. Introduzione all'impiego delle energie di legame. Legge di Hess. Determinazione della DHf dalla DHcomb usando la bomba calorimetrica. Uso delle tavole di energie di legame e della struttura delle sostanze coinvolte per calcolare energie di combustione e formazione. Bilanciamento delle reazioni. Acidi e basi, pH. Formula di Pauling per l'elettronegatività. Uso dell'elettronegatività per stimare energie di legame e momenti di dipolo. Momenti di dipolo di molecole poliatomiche e casi in cui è nullo per simmetria. Energia reticolare di solidi ionici, costante di Madelung, formula di Kapustinskii. Pile chimiche: esempio pila a secco. Collegamento tra E e DG. Energia prodotta da una pila.

Testi consigliati:

- 1) Dispensa del docente
- 2) Dickerson, R.E. Gray, H.B. and Haight, G.P. *Chemical principles*.
- 3) Cartmell, E. Fowles, G.W.A. *Valency and molecular structure*