

INSEGNAMENTO/MODULO CHIMICA INORGANICA

ANNO ACCADEMICO: **2017-2018**

TIPOLOGIA DI ATTIVITÀ FORMATIVA: attività CARATTERIZZANTE

DOCENTE: Mario Amati

e-mail: mario.amati@unibas.it

sito web: scienze.unibas.it/site/home.html.

telefono: 0971/20215935

cell.

Lingua di insegnamento: italiano

n. CFU: 10 (7 di lezione e 3 di esercitazioni/laboratorio)	n. ore: 92 (56 di lezione frontale e 36 di esercitazione/laboratorio)	Sede: Potenza Dipartimento/Scuola: Dipartimento di Scienze CdS	Semestre Annuale 02/10/2017 al 1- 15/06/2018
---	---	--	---

OBIETTIVI FORMATIVI E RISULTATI DI APPRENDIMENTO

- **Conoscenze:** Il corso è centrato sulla chimica dei complessi dei metalli di transizione, sia di tipo organometallico che classico. Sono approfonditi temi quali la struttura, le proprietà chimiche e fisiche e la reattività dei suddetti complessi. Saranno inoltre trattati temi riguardanti la caratterizzazione computazionale di complessi metallici.
Le principali conoscenze acquisite sono:
 - interazione metallo-legante ed effetti sulla struttura e sulle proprietà fisiche dei complessi metallici;
 - isomeria e reazioni di isomerizzazione in complessi metallici;
 - reazioni redox in complessi ottaedrici;
 - reazioni di sostituzione in complessi quadrato-planari ed ottaedrici;
 - complessi organometallici di metalli di transizione: struttura e proprietà;
 - sintesi e reattività di complessi organometallici;
 - attività di laboratorio: applicazione di metodi computazionali alla previsione della struttura, proprietà e reattività di complessi metallici.
- **Abilità:** la principale abilità acquisite in seguito allo studio dell'insegnamento di Chimica Inorganica consiste nell'interpretazione di osservazioni sperimentali riguardanti la struttura, le proprietà fisiche e la reattività di complessi di metalli di transizione classici e organometallici. In particolare, lo studente deve essere in grado di:
 - spiegare proprietà quali la spettroscopia, il magnetismo, la geometria di coordinazione e il numero di coordinazione osservati sperimentali sulla base delle proprietà del metallo centrale e dei leganti;
 - determinare tutti i possibili stereoisomeri in complessi metallici nelle loro diverse geometrie di coordinazione;
 - interpretare le reattività osservate in processi redox e di sostituzione;

PREREQUISITI

Lo studente deve conoscere concetti fondamentali della Chimica che ragionevolmente sono stati acquisiti nel corso di laurea triennale. Questi possono essere riassunti nei seguenti punti:

- strutture di Lewis e modello VSEPR;
- simmetria puntuale;
- conoscenze di base di chimica quantistica, in particolare il concetto di orbitale, l'approccio Hartree-Fock ed il metodo MO-LCAO;
- legge cinetica, teoria dello stato di transizione, equazioni di Arrhenius e Eyring;
- termodinamica classica.

CONTENUTI DEL CORSO

- Proprietà fisiche e strutturali in complessi classici: 24 ore

Interazione metallo legante. MO-LCAO applicato a complessi metallici. Leganti donatori σ , donatori π ed accettori π . Proprietà magnetiche e spettroscopiche. Geometria di coordinazione e numero di coordinazione.

- Stereochimica in complessi metallici: 6 ore

Isomeria costituzionale e stereoisomeria in complessi metallici nelle loro diverse geometrie di coordinazione.

Stereoisomeria originata dalla sfera di coordinazione, stereoisomeria λ/δ e Λ/Δ . Nomenclatura IUPAC degli stereoisomeri.

- Processi redox in complessi ottaedrici: 6 ore

Processi redox a sfera interna ed esterna: meccanismi di reazione ed interpretazione della velocità di reazione osservata.

- Processi di sostituzione in complessi metallici: 10 ore

Reazioni di sostituzione in complessi quadrato-planare: meccanismo di reazione e fattori che influenzano la cinetica di reazione; reazioni di sostituzione in complessi ottaedrici: meccanismo di reazione e cinetica di reazione.

- Complessi organometallici: 10 ore

Proprietà e struttura in complessi organometallici dei metalli di transizione. Regola dei 16 e 18 elettroni. Sintesi e reattività dei complessi organometallici

- Laboratorio computazionale: 36 ore

Applicazione di semplici procedure di calcolo finalizzate alla simulazione computazionale di proprietà di complessi di metalli di transizione. Valutazione della repulsione sterica e dell'interazione metallo legante in complessi a coordinazione 4, 5 e 6. Previsione computazionale di parametri quali Δ_0 , riempimento ad alto o basso spin, geometria di coordinazione, influenza *trans* ed l'effetto *trans*, distorsione di Jahn-Teller, etc.

METODI DIDATTICI

Il corso prevede 92 ore di didattica tra lezioni e laboratorio. In particolare sono previste 56 ore di lezione in aula e 36 ore di laboratorio. Il laboratorio è di tipo computazionale ed è svolto in aula su computer portatili.

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Il corso prevede una prova di esame orale riguardante i temi trattati nelle lezioni frontali. Anche se in misura minore, il giudizio sulle attività di laboratorio svolte concorrerà al voto finale. Tale giudizio sarà formulato in base alla correzione di relazioni di laboratorio.

TESTI DI RIFERIMENTO E DI APPROFONDIMENTO, MATERIALE DIDATTICO ON-LINE

Durante il corso, ciascuno studente riceve tabelle e figure fotocopiate riguardanti i temi trattati.

Testi di riferimento:

Inorganic Chemistry

K. F. Purcell, J. C. Kotz

Holt-Saunders International Editions

Inorganic Chemistry

Gary L. Miessler, Donald A. Tarr

Pearson Educational International

Symmetry and Spectroscopy

D.C. Harris, M. D. Bertolucci

Dover

Chimica Inorganica

D.F. Shriver, P.W. Atkins, C.H. Langford

Zanichelli

METODI E MODALITÀ DI GESTIONE DEI RAPPORTI CON GLI STUDENTI

Dato il numero normalmente esiguo di studenti (di solito inferiore a 10), gli studenti possono concordare

appuntamenti col docente al fine di ricevere chiarimenti sui temi trattati. Non ci sono limitazioni al giorno e all'ora degli appuntamenti. Il ricevimento degli studenti avviene presso lo studio del docente.
Anche le date di appello sono concordate (di fatto) sulla base delle esigenze degli studenti.

DATE DI ESAME PREVISTE¹

Le date possono essere spostate (o altre potrebbero essere aggiunte) su richiesta degli studenti.

26/01/2018, 23/02/2018, 23/03/2018, 27/04/2018, 25/05/2018, 22/06/2018, 27/07/2018, 28/09/2018, 26/10/2018, 23/11/2018, 25/07/2018, 21/12/2018.

SEMINARI DI ESPERTI ESTERNI SI ☐ **NO** ☒

ALTRE INFORMAZIONI
