

**Sapienza Università di Roma - Facoltà di Ingegneria -
Ingegneria delle Nanotecnologie Industriali (Corso di laurea magistrale - DM 270/04)
Corso di Chimica Superiore (9 CFU)
Docenti: Prof. Mauro Pasquali**

STRUTTURA ELETTRONICA DEGLI ATOMI E CLASSIFICAZIONE PERIODICA DEGLI ELEMENTI

Modello ondulatorio - corpuscolare della luce. Spettri atomici. Il modello quantistico di Bohr dell'atomo di idrogeno. Principio di indeterminazione di Heisenberg. Formula di De Broglie. Modello quantistico-ondulatorio dell'atomo di idrogeno: Equazione di Schrödinger

Orbitali di tipo "s", "p", "d" ed "f" loro forma. Struttura elettronica di atomi polielettronici: principio di esclusione di Pauli e della massima molteplicità (o di Hund). Sistema periodico. Carica nucleare effettiva. Energia di ionizzazione, affinità elettronica, raggio atomico e loro periodicità

LEGAMI CHIMICI - STRUTTURE E GEOMETRIE MOLECOLARI

Legame atomico (o covalente): Teoria del legame di valenza e teoria degli orbitali molecolari. Legami atomici semplici doppi e tripli. Legami atomici dativi (o di coordinazione). Polarità nei legami atomici. Molecole polari e non polari. Elettronegatività degli elementi, componente ionica nel legame covalente.

Il legame ionico: energia reticolare. I raggi ionici e le strutture cristalline nei solidi ionici; il numero di coordinazione.

Il legame metallico: Cella esagonale compatta, cubica a facce centrate, cubica a corpo centrato. Proprietà dei metalli: conducibilità elettrica, conducibilità termica, effetto fotoelettrico e termoionico, proprietà ottiche (hanno lucentezza), Elettropositività, Duttilità e malleabilità, Elevata densità (elevato numero di atomi per unità di volume).

I conduttori, i semiconduttori, gli isolanti. Semiconduttori di tipo P e di tipo N.

Legami misti; trattazione di Heitler e London; la risonanza. Legame misto ionico-covalente, Legame misto metallico-covalente

I legami deboli: il legame idrogeno e i legami di Van der Waals.

Ibridazione: di tipo "sp", "sp²", "sp³", "sp³d" ed "sp³d²". Geometria delle molecole: Lineare XY₂, Trigonale piana XY₃, Angolare (:)XY₂, Tetraedrica XY₄, Piramidale trigonale (:)XY₃, Angolare a V (:)₂XY₂, Bipiramidale trigonale XY₅, Tetraedrica irregolare (:)XY₄, Piana a T (:)₂XY₃, Ottaedrica XY₆, Piramidale a base quadrata (:)XY₅, Quadrata piana (:)₂XY₄.

STATO SOLIDO. Solidi covalenti: La silice, il carbonio diamante, il carbonio grafite. I fullereni, i nano tubi di carbonio a parete singola zig zag e armchair; Chiralità nei nanotubi. Nanotubi a parete multipla. Proprietà meccaniche, elettriche ed usi. Metodi di sintesi e purificazioni.

Solidi metallici: I nano tubi di oro, loro sintesi e proprietà nel campo della sensoristica. Nanoparticelle di Pt: Elettrocatalisi, utilizzo nelle fuel cell come catalizzatore.

CRISTALLOGRAFIA. Strutture cristalline: I reticoli di Bravais. Struttura cubica a corpo centrato, struttura cubica a facce centrate, struttura esagonale compatta; Relazione tra raggio atomico (o raggio ionico) e la costante reticolare.

Posizione degli atomi nella cella elementare; Direzioni nelle celle elementari; Piani nelle celle elementari; Indici di Miller. Il fenomeno del polimorfismo.

I raggi X per la determinazione della struttura cristallina: Legge di Bragg.

Soluzioni solide: Difetti intrinseci sostituzionali e interstiziali, difetti estrinseci. Difetti cristallini di linea.

LO STATO LIQUIDO. Proprietà macroscopiche dei liquidi: Viscosità, energia superficiale, pressione di vapore, temperatura di solidificazione e temperatura di ebollizione.

I liquidi ionici. I cristalli liquidi.

TERMODINAMICA DELLE REAZIONI CHIMICHE. L'equilibrio chimico. Variazione dell'energia libera del sistema nel progressivo avanzamento di una reazione fino all'equilibrio. Legge dell'equilibrio chimico e sua derivazione termodinamica. Costante standard (di equilibrio) di una reazione. Dipendenza della costante di equilibrio dalla temperatura: equazione di van t'Hoff. Reazioni termodinamicamente favorite e rendimento massimo di una reazione. Effetti sulla composizione di un sistema all'equilibrio provocati: (a) da una variazione della quantità dei componenti, (b) da una variazione della pressione o del volume, (c) da una variazione della temperatura e (d) dalla presenza di un gas inerte.

EQUILIBRI IONICI IN SOLUZIONE ACQUOSA.

La reazione di auto protolisi dell'acqua e la sua costante di ionizzazione. Soluzioni neutre, acide e basiche: pH. Elettroliti a struttura ionica e non ionica: acidi e basi (di Bronsted e di Lewis), sali ed anfolti. Soluzioni sature di soluti elettrolitici: costante standard di solubilità. La formazione di cristalli per precipitazione.

ELETTROCHIMICA.

Reazioni redox e possibilità di conversione di "energia chimica" in "energia elettrica" e viceversa in dispositivi elettrochimici: celle galvaniche e celle di elettrolisi. Semielementi galvanici: elettrodi di prima specie ed elettrodi ad amalgama, elettrodi di seconda specie, elettrodi a gas ed elettrodi redox. Equilibrio elettrochimico di un semielemento e di un elemento galvanico. Forza elettromotrice di un elemento galvanico. L'equazione di Nernst. Potenziale e potenziale standard di un semielemento. Semielemento standard di idrogeno. Tabella dei potenziali standard di riduzione di coppie redox e sue applicazioni. Elettrolisi in soluzioni acquose e in sali fusi. Lavoro elettrico, sovratensione e rendimento energetico nei dispositivi elettrochimici.

La chimica del Carbonio

Idrocarburi alifatici: alcani e cicloalcani.

Idrocarburi alifatici: alcheni ed alchini.

Idrocarburi aromatici.

Nomenclatura e struttura dei principali gruppi funzionali.

Stereochimica: isomeria strutturale, stereoisomeria, isomeria conformazionale, isomeria geometrica, chiralità.

Nomenclatura, struttura, proprietà e reazioni delle seguenti classi di composti organici: alogenuri alchilici ed arilici, alcoli, fenoli, eteri, aldeidi, chetoni, acidi carbossilici e derivati, composti organici dell'azoto, composti organici dello zolfo, eterocicli alifatici ed aromatici.

Cenni di tecniche spettroscopiche utilizzate in Chimica Organica: IR, UV, VIS, NMR, MS.

Cenni sulla chimica dei polimeri.

Composti organici aventi interesse nei campi dell'elettronica molecolare, dell'elettroluminescenza e del fotovoltaico organico.