



Universita' degli Studi di Padova  
FACOLTA' DI SCIENZE MM.FF.NN.

## **Bollettino Notiziario**

Anno Accademico 2002/2003

# **Laurea Quinquennale in Chimica**

Programmi dei Corsi

---

# Curriculum: Corsi comuni

---

## ANALISI MERCEOLOGICA (MOD. A)

(Titolare: Dott.ssa GABRIELLA FAVARO)

**Periodo:** 1 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 25A+10E 0,00 CFU

### Prerequisiti :

lo studente deve possedere le conoscenze di base di chimica analitica strumentale impartite nel corso di Chimica Analitica II.

### Obiettivi formativi :

Il corso si propone di fornire conoscenze adeguate sulle caratteristiche chimiche dei prodotti alimentari che ne caratterizzano la qualità e sui procedimenti analitici per la loro determinazione, approfondendo la conoscenza degli aspetti soprattutto pratici e applicativi delle varie tecniche strumentali impiegate.

### Contenuto dell'attività formativa :

Analisi di prodotti lattiero-caseari: latte, formaggi.

Analisi di oli e grassi alimentari: burro, margarina, grassi di maiale, grassi idrogenati, olio d'oliva, olio di semi.

### Struttura della verifica di profitto :

Orale

### Descrizione verifica profitto :

esame orale.

### Testi di riferimento :

E. Tateo, "Analisi dei prodotti alimentari", 2 vol., Chirotti, Pinerolo 1978.

R. Giuliano, M.L. Stein, "Quaderni di chimica degli alimenti", 5 vol, Bulzoni, Roma 1989-1997.

H.-D. Blitz, W. Grosch, "Food Chemistry", 2nd ed., Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 1999.

R.D. O'Brien, "Fats and Oils", Technomic, Lancaster, USA, 1998.

---

## BIOCHIMICA FISICA (MOD. A)

(Titolare: Prof. GIUSEPPE ZANOTTI)

**Periodo:** 2 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 25A+10E 0,00 CFU

### Obiettivi formativi :

Il corso tratta alcuni aspetti chimico-fisici della biochimica e biologia molecolare. Gli argomenti principali riguardano le principali tecniche di caratterizzazione strutturale e conformazionale delle macromolecole, viste in relazione alle proprietà funzionali di queste ultime.

Nella prima parte del corso verranno descritte brevemente le tecniche di estrazione e purificazione di proteine e, in maggiore dettaglio, la loro caratterizzazione strutturale mediante diffrazione dei raggi X.

### Contenuto dell'attività formativa :

1. Espressione di proteine. Estrazione di proteine da colture batteriche o da tessuti. Cenni sui metodi di purificazione.

2. Tecniche elettroforetiche e criteri di purezza.

3. Diffrazione dei raggi X su monocristallo. Principi generali.

4. Tecniche di cristallizzazione di proteine globulari e misura dei dati di diffrazione.

5. Risoluzione del problema della fase. Metodi MIR, MR e MAD.

6. Affinamento delle strutture macromolecolari.

7. Utilizzo dei dati strutturali.

### Struttura della verifica di profitto :

Orale

### Testi di riferimento :

Cantor and Schimmel "Biophysical Chemistry" (1980) Freeman and Company, San Francisco

T. D. W. Claridge, "High-resolution NMR Techniques in Organic Chemistry", Elsevier, 1999.

H. Günther, "NMR Spectroscopy", 2nd ed., John Wiley & Sons, 1995.

J. K. M. Sanders and B. K. Hunter, "Modern NMR Spectroscopy", 2nd ed., Oxford University Press, 1994.

H. Friebolin, "Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy", VCH, 1991.

R. M. Silverstein and F. X. Webster, "Identificazione Spettroscopica di Composti Organici", Casa Editrice Ambrosiana, 1999.

**Ausili didattici :**

Parte del materiale verrà fornito a lezione.

## BIOCHIMICA FISICA (MOD. B)

(Titolare: Prof. STEFANO MAMMI)

**Periodo:** 2 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 25A+10E 0,00 CFU

**Obiettivi formativi :**

Il corso tratta alcuni aspetti chimico-fisici della biochimica e biologia molecolare. Gli argomenti principali riguardano le principali tecniche di caratterizzazione strutturale e conformazionale delle macromolecole, viste in relazione alle proprietà funzionali di queste ultime.

Questo Modulo illustra la determinazione della struttura in soluzione di peptidi e proteine mediante spettroscopia NMR. Saranno anche trattati i metodi di calcolo utili per l'interpretazione dei dati sperimentali.

**Contenuto dell'attività formativa :**

1. Richiami ai principi di base dell'NMR: chemical shift, accoppiamento scalare, accoppiamento dipolare, effetto nucleare Overhauser. Aspetti pratici: acquisizione in quadratura di fase, cicli di fase, trattamento del FID.
2. Il formalismo degli operatori prodotto. Introduzione alla spettroscopia NMR bidimensionale. Concetto di coerenza e trasferimenti di coerenza.
3. Esperimenti 2D omonucleari: COSY e varianti, TOCSY, NOESY, ROESY.
4. Spettroscopia di correlazione eteronucleare inversa.
5. Esperimenti 3D omonucleari ed eteronucleari.
6. Spettroscopia con impulsi a gradiente: selezione dei cammini di coerenza.
7. Utilizzo dei parametri NMR per la risoluzione della struttura di peptidi e proteine. Pattern caratteristici di particolari strutture secondarie.
8. Metodi di calcolo: distance geometry, molecular dynamics.

**Struttura della verifica di profitto :**

Orale

**Descrizione verifica profitto :**

esame orale.

**Testi di riferimento :**

Cantor and Schimmel "Biophysical Chemistry" (1980) Freeman and Company, San Francisco

T. D. W. Claridge, "High-resolution NMR Techniques in Organic Chemistry", Elsevier, 1999.

H. Günther, "NMR Spectroscopy", 2nd ed., John Wiley & Sons, 1995.

J. K. M. Sanders and B. K. Hunter, "Modern NMR Spectroscopy", 2nd ed., Oxford University Press, 1994.

H. Friebolin, "Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy", VCH, 1991.

R. M. Silverstein and F. X. Webster, "Identificazione Spettroscopica di Composti Organici", Casa Editrice Ambrosiana, 1999.

**Ausili didattici :**

Parte del materiale verrà fornito a lezione.

## BIOPOLIMERI

(Titolare: Prof. EVARISTO PEGGION)

**Periodo:** 1 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 50A+20E 0,00 CFU

**Prerequisiti :**

dovrebbero essere ritenuti propedeutici i corsi di Chimica Organica I e II e di Chimica Fisica I. È suggerita la frequenza propedeutica a un corso di Biochimica.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Il corso tratta in generale la struttura, la conformazione e le proprietà di macromolecole di interesse biologico quali polipeptidi e proteine, polinucleotidi e polisaccaridi. Nella prima parte del corso vengono descritte e discusse le proprietà strutturali di biopolimeri naturali e sintetici. Nella seconda parte del corso vengono descritte le principali metodologie per lo studio di conformazioni, transizioni conformazionali e interazioni di biopolimeri. Il programma si articola nei seguenti punti:

1) Polipeptidi e macromolecole proteiche.

Chimica e stereochimica di residui peptidici. Concetti di struttura primaria, secondaria, terziaria e quaternaria. Descrizione dettagliata di vari tipi di conformazioni ordinate di catene polipeptidiche. Strutture terziarie e quaternarie con esempi. Analisi conformazionale e forze che determinano la struttura di peptidi e proteine.

2) Polinucleotidi

Chimica e stereochimica di nucleotidi. Proprietà tipiche di basi puriniche e pirimidiniche e loro derivati. Strutture primarie, secondarie terziarie e quaternarie di acidi nucleici. Differenze strutturali tra DNA e RNA. Analisi conformazionale e forze che determinano la struttura di acidi nucleici.

3) Polisaccaridi

Chimica e stereochimica di unità strutturali di polisaccaridi. Strutture di monosaccaridi, disaccaridi, omopolisaccaridi, eteropolisaccaridi. Energia conformazionale di polisaccaridi e mappe tipo Ramachandran. Cenno alla struttura di alcuni peptidoglicani.

1) Metodi di indagine per lo studio della struttura e delle proprietà conformazionali di Biopolimeri

Determinazione di peso molecolare: ultracentrifugazione, diffusione della luce proprietà colligative, cromatografia di esclusione, elettroforesi.

Spettroscopia di assorbimento e di dicroismo circolare, con discussione delle proprietà-elettroniche dei vari gruppi cromofori presenti in macromolecole biologiche.

Spettroscopia NMR con le applicazioni più importanti per lo studio di dettagli strutturali di biopolimeri.

Spettroscopia IR e di fluorescenza.

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta

**Testi di riferimento :**

C.R. Cantor, P.R. Schimmel, "Biophysical Chemistry", W.H. Freeman and Co., San Francisco, 1980

G.E. Schulz, R.H. Shirmer, "Principles of Protein Structure", Springer Verlag, Heidelberg, New York, Berlin.

## CHIMICA ANALITICA 2

(Titolare: Prof. FRANCO MAGNO)

**Periodo:** III anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:**

**Tipologie didattiche:** 70A 0,00 CFU

**Obiettivi formativi :**

richiamare ed illustrare i principi fondamentali delle più importanti tecniche analitiche strumentali e fornire le basi per una corretta utilizzazione della strumentazione e del dato analitico.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Metodi di analisi mediante distribuzione tra fasi. Estrazione. Ripartizione di uno o più componenti tra due fasi. Costante di ripartizione, rapporto di distribuzione, frazione

estratta. Fattori che governano la distribuzione e l'estrazione.

Gas-cromatografia di ripartizione e di adsorbimento. Teoria dei piatti e dinamica, profilo di distribuzione, altezza equivalente del piatto teorico (HETP). Influenza della velocità dell'eluente e della temperatura sulla separazione. La risoluzione e l'efficienza di una colonna.

Analisi qualitativa e quantitativa. Strumentazione.

Rivelatori, loro efficienza nella risposta, selettività, condizioni operative. Colonne a riempimento e capillari.

Cromatografia su colonna, su carta, TLC, HPLC, Cromatografia HPLC in fase normale ed in fase inversa. Ottimizzazione dell'eluente.

Scambio ionico e cromatografia di scambio ionico con soppressione. Caratteristiche di uno scambiatore, selettività. Cromatografia di esclusione dimensionale. Cromatografia con fluidi supercritici.

Elettroanalitica. Le reazioni elettrochimiche: trasferimento di carica e di materia, equazione del flusso. Metodi voltammetrici. Metodi polarografici, amperometria, biampereometria. Coulometria. Metodi potenziometrici, ISE. Metodi conduttometrici.

Metodi di analisi spettrofotometrici. Generalità sull'interazione radiazione elettromagnetica materia Analisi spettrofotometrica di assorbimento, UV-VIS, IR.

Legge di Lambert-Beer e sue deviazioni. Strumentazione. Titolazioni

spettrofotometriche, equilibri. Spettrometria di emissione e di assorbimento atomico.

Atomizzatori e sorgenti. Fluorescenza molecolare.

Metodi termici di analisi. Analisi termica gravimetrica (TGA). Analisi termica differenziale (DTA). Calorimetria differenziale a scansione (DCS). Titolazioni

termometriche (TT).

Spettrometria di massa. Strumentazione. Produzione degli ioni, loro separazione e raccolta. Strumenti a singolo e doppio fuoco.

Strumento a tempo di volo a quadrupolo. Potere risolutivo di uno spettrometro di massa. Accoppiamento gascromatografo-

SM: Sistemi di introduzione del campione. Metodi di ionizzazione e

procedure. Ionizzazione elettronica (EI), ionizzazione chimica (CI), con laser (MALDI) Metodi radiochimici di analisi. Tipi di decadimento, tempo di semitrasformazione,

rivelatori a gas, a scintillazione, a stato solido. Analisi per attivazione neutronica.

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta

### Testi di riferimento :

Skoog and Leary, "Chimica Analitica Strumentale", Edises, 1995.

H.A. Strobel and W.R. Heineman, "Chemical Instrumentation", J. Wiley & Sons 1989.

R. Cozzi, P. Proti, T. Ruaro "Analisi Chimica Strumentale", Zanichelli, 1997

## CHIMICA BIO-ORGANICA

---

(Titolare: Prof. CLAUDIO TONIOLO)

**Periodo:** 2 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 50A+20E 0,00 CFU

### Propedeuticità :

è opportuno che lo studente abbia superato gli esami di Chimica Organica I e II

### Contenuto dell'attività formativa :

Aminoacidi. Generalità e classificazioni. Metodi generali di sintesi chimica.

Risoluzione dei racemati. Sintesi asimmetriche. Proprietà chimiche, chimicofisiche e spettroscopiche. Modifiche post-traslazionali.

Reazioni cromatiche e tecniche analitiche.

Peptidi. Sintesi di peptidi: tattica e strategia. Gruppi protettori delle funzioni alfa- amminica e alfa-carbossilica e delle funzioni in catena laterale. Attivazione della

funzione alfa-carbossilica. Reazioni collaterali. Racemizzazione. Sintesi su polimeri insolubili e solubili. Chimica combinatoriale. Sintesi per mezzo di enzimi.

Semisintesi. Struttura del legame peptidico. Tipi di forze che determinano la struttura secondaria. Mappa conformazionale di Ramachandran. Strutture secondarie ordinate e ripiegamenti. Denaturazione. Metodi chimico-fisici e spettroscopici per studiare le strutture secondarie. Proteine fibrose (fibroina, collagene, cheratina e miosina, elastina).

Enzimi: Enzimi e catalisi: introduzione. Esempio di azione enzimatica: chimotripsina.

Modelli di intermedi tetraedrici. Altri enzimi idrolitici: pepsina, papaina, lisozima.

Enzimi immobilizzati. Gli enzimi nella sintesi organica. Polimeri come analoghi di enzimi.

### Struttura della verifica di profitto :

Orale

### Descrizione verifica profitto :

orale (alla fine del corso)

### Testi di riferimento :

G.C. Barrett, "Chemistry and Biochemistry of the Amino Acids", Chapman and Hall, 1985

J. Jones, "The Chemical Synthesis of Peptides", Oxford Science, 1991

H. Dugas, "Bioorganic Chemistry", Springer, 1996 (3<sup>a</sup> edizione).

### Ausili didattici :

Appunti di lezione

## CHIMICA BIOINORGANICA

---

(Titolare: Prof. ARMANDO MARZOTTO)

**Periodo:** 1 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 50A+20E 0,00 CFU

### Prerequisiti :

Chimica generale ed inorganica e Chimica organica. Si consiglia inoltre la frequenza di qualche altro corso di argomento biochimico.

### Obiettivi formativi :

far conoscere agli studenti il ruolo degli ioni metallici, presenti nei sistemi biologici in quantità elevate o in traccia, sia dal punto di vista chimico che strutturale. Il corso tratta del ruolo delle specie inorganiche, endogene ed esogene, "in vivo" in relazione alla posizione da loro occupata nel Sistema Periodico, con particolare riguardo sia alla loro chimica in soluzione acquosa e all'importanza delle interazioni non-covalenti in biologia, sia alla struttura molecolare e alla funzione dei complessi metallici con biomolecole.

### Contenuto dell'attività formativa :

Richiami alle nozioni fondamentali di chimica di coordinazione. Aspetti termodinamici e cinetici. Strutture elettroniche e geometriche di ioni metallici in biologia.

Classificazione degli elementi, in base a criteri biomedici, in essenziali, utili e tossici.

Ciclo degli elementi in natura. Risposta bifasica e tossicità degli elementi in tracce. Biodisponibilità e funzione biologica degli elementi dei gruppi principali (s, p) e dei gruppi di transizione (d, f).

Funzioni di deposito, di trasporto e di biomineralizzazione di ioni dei metalli alcalini e alcalino-terrosi e dei metalli di transizione. Pompe ioniche. Leganti tetrapirrolici: macrocicli della porfirina e della corrina. Assunzione, deposito e trasporto di diossigeno. Eme ed emoproteine: emoglobina, mioglobina e citocromi. Clorofilla e centri fotosintetici di magnesio e di manganese. Cobalammine, vitamina B12 e coenzima B12.

Acidi nucleici (RNA e DNA), proteine e loro costituenti come leganti biologici. Ruolo degli ioni metallici. Siti di coordinazione, geometria e struttura molecolare dei complessi metallici. Funzioni delle metalloproteine contenenti centri di ferro, di rame

e di zinco. Metalloproteine con funzioni di trasferimento elettronico: citocromi e proteine ferro-zolfo, clusters metallici. Funzioni dei metalloenzimi, proprietà catalitiche e strutturali del centro metallico nel sito attivo, geometrie di coordinazione e meccanismi di azione enzimatica con esempi: anidrasi carbonica, carbossipeptidasi, superossidodismutasi di rame e zinco e alcoldeidrogenasi.

Metalli in medicina. Impiego di complessi del tecnezio ( $^{99m}\text{Tc}$ ) per scopi diagnostici, di complessi di platino (cisplatino) come farmaci antitumorali e di complessi di oro come agenti antiartritici.

Cenni sulle principali metodologie impiegate nello studio delle interazioni dei metalli con i sistemi biologici.

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta

**Testi di riferimento :**

I. Bertini, H. B. Gray, S. J. Lippard, J. S. Valentine "Bioinorganic Chemistry", Ed. University Science Books Mill Valley, California; S. J. Lippard, J. M. Berg "Principles of Bioinorganic Chemistry", Ed. University Science Books Mill Valley, California

**Ausili didattici :**

Appunti di lezione.

## CHIMICA BIOLOGICA (MOD. A)

(Titolare: da definire) - Mutuato da: Laurea di primo livello in Chimica Industriale

**Periodo:** III anno, 2 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:**

**Tipologie didattiche:** 35A 0,00 CFU

**Prerequisiti :**

oltre alla chimica organica I e II, sono necessarie conoscenze di base di termodinamica e cinetica.

**Propedeuticità' :**

Chimica Organica I.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Proteine: aminoacidi e legame peptidico; polipeptidi; proteine globulari e fibrose;

struttura primaria, secondaria, terziaria e quaternaria delle proteine; proprietà chimico-fisiche; stabilità e denaturazione; classificazioni.

Relazioni struttura-funzione:

mioglobina ed emoglobina.

Lipidi: proprietà chimico-fisiche dei lipidi; struttura delle membrane biologiche.

Carboidrati: monosaccaridi e polisaccaridi naturali più importanti e loro derivati.

Acidi nucleici: struttura di DNA e RNA; il codice genetico.

Catalisi enzimatica: enzimi come catalizzatori; coenzimi; cinetica enzimatica:

equazioni di Michaelis-Menten e Lineweaver-Burk; meccanismo d'azione;

regolazione dell'attività enzimatica; allosteria e cooperatività.

Cenni di biologia molecolare. Clonazione ed espressione di proteine in organismi procarioti.

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta

**Descrizione verifica profitto :**

esame unico alla fine del corso, con modalità da stabilirsi.

**Testi di riferimento :**

A. L. Lehninger, "Principi di Biochimica", Ed. Zanichelli.

Altri testi

L. Streyer, "Biochimica", Ed. Zanichelli.

Matthews and van Holden, "Biochimica", Ed. Ambrosiana.

## CHIMICA BIOLOGICA (MOD. B)

(Titolare: da definire) - Mutuato da: Laurea di primo livello in Chimica Industriale

**Periodo:** III anno, 2 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:**

**Tipologie didattiche:** 35A 0,00 CFU

**Prerequisiti :**

oltre alla chimica organica I e II, sono necessarie conoscenze di base di termodinamica e cinetica.

**Propedeuticità' :**

Chimica Organica I.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Bioenergetica: il flusso dell'energia negli organismi viventi; i composti ricchi di energia; il significato energetico dei cicli metabolici; ossidoriduzioni biologiche;

enzimi ossidoriduttivi. La fotosintesi

Metabolismo dei carboidrati: glicogenolisi; glicogenosintesi; glicolisi; fermentazione alcolica; il ciclo di Krebs; la fosforilazione ossidativa e la catena respiratoria;

*bilancio energetico dell'ossidazione del glucosio; gluconeogenesi; il ciclo dei pentosofosfati.*

*Metabolismo dei lipidi: ossidazione degli acidi grassi; ciclo extramitochondriale del citrato; biosintesi degli acidi grassi.*

*Metabolismo delle proteine: metabolismo generale degli aminoacidi; deaminazione ossidativa; destino del gruppo NH<sub>2</sub>; il ciclo dell'urea; aminoacidi glucogenici e chetogenici; aminoacidi essenziali.*

*Metabolismo degli acidi nucleici: ribonucleasi, fosfodiesterasi, desossiribonucleasi;*

*biosintesi del DNA; biosintesi di RNA; biosintesi proteica.*

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta

**Descrizione verifica profitto :**

*esame unico alla fine del corso, con modalità da stabilirsi.*

**Testi di riferimento :**

A. L. Lehninger, "Principi di Biochimica", Ed. Zanichelli.

Altri testi

L. Streyer, "Biochimica", Ed. Zanichelli.

Matthews and van Holden, "Biochimica", Ed. Ambrosiana.

## CHIMICA DELLE MACROMOLECOLE

(Titolare: Prof.ssa PAOLA SPADON)

**Periodo:** 2 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:**

**Tipologie didattiche:** 50A+20E 0,00 CFU

**Prerequisiti :**

*buona conoscenza degli argomenti trattati nei Corsi di Chimica organica e di Chimica fisica.*

**Obiettivi formativi :**

*il corso è fornire i concetti fondamentali di chimica macromolecolare, comprendenti processi di sintesi di catene polimeriche, reazioni di modifica e metodiche di caratterizzazione. Viene sottolineata, a livello teorico, l'importanza applicativa dei polimeri.*

**Contenuto dell'attività formativa :**

*Concetti introduttivi: macromolecola, unità strutturale, monomero, microstruttura di catene polimeriche, omopolimeri e copolimeri, polimeri stereoregolari, grado di polimerizzazione, pesi molecolari medi e curve di distribuzione dei pesi molecolari.*

*Processi di polimerizzazione: aspetti termodinamici e cinetici. Polimerizzazione a stadi e a catena. Reazioni di copolimerizzazione.*

*Modifiche chimiche in catene polimeriche. Termodinamica di miscele binarie solvente-polimero: teoria del reticolo, parametro di interazione, concetto di volume escluso, dimensioni medie di catene polimeriche. Pressione osmotica di soluzioni di macromolecole. Metodo della*

*diffusione della luce. Viscosità intrinseca e cromatografia di gel permeazione.*

*Tecniche di frazionamento. Termodinamica di miscele ternarie, costituite da un solvente e da due polimeri: diagrammi di fase.*

*Termodinamica di miscele polimeriche.*

*Viene inoltre fornita agli studenti letteratura relativa ad argomenti specifici, da considerarsi oggetto di studio facoltativo.*

**Struttura della verifica di profitto :**

Orale

**Descrizione verifica profitto :**

*orale, con eventuale ulteriore discussione su argomenti facoltativi.*

**Testi di riferimento :**

AA.VV., "Macromolecole: scienza e tecnologia", Pacini Editore Pisa Vol. I e II (1986)

AA.VV., "Fondamenti di scienza dei polimeri", Pacini Editore Pisa (1998).

M.R. Allcock, E.W. Lampe, "Contemporary Polymer Chemistry", Prentice-Hall, Inc.

L.H. Sperling, "Introduction to physical polymer science", Second Edition, Wiley Interscience.

D.S. Smith, "Addition Polymers. Formation and Characterization".

**Ausili didattici :**

Appunti di lezione

## CHIMICA FISICA 2

(Titolare: Prof. CARLO CORVAJA)

**Periodo:** III anno, 2 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:**

**Tipologie didattiche:** 70A 0,00 CFU

**Contenuto dell'attività formativa :**

*Il corso si propone di introdurre lo studente alle spettroscopie molecolari ed alle loro applicazioni per la caratterizzazione di specie chimiche e per lo studio delle proprietà molecolari.*

*Saranno descritte le caratteristiche della radiazione elettromagnetica nei vari intervalli spettrali, la loro generazione e rivelazione.*

*Verrà trattata l'interazione radiazione-materia, e saranno descritti i vari processi interessanti le spettroscopie, come assorbimento, emissione e diffusione, ricavando le probabilità di transizione spontanea e indotta.*

*Si ricaveranno in termini generali i fattori che regolano l'intensità delle righe spettrali e la loro forma, con riferimento anche alle proprietà di*

simmetria degli stati.

Si tratteranno gli aspetti generali delle spettroscopie rotazionale, vibrazionale, Raman, spettroscopie d'assorbimento ed emissione elettronica, la spettroscopia di fotoelettroni, le spettroscopie magnetiche di spin nucleare e di spin elettronico.

Le tecniche spettroscopiche in onda continua saranno affrontate con le tecniche risolte nel tempo e a trasformata di Fourier.

Saranno fatti alcuni cenni alla spettroscopia Moessbauer ed alle tecniche diffrattometriche per la determinazione di strutture cristalline.

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta

## CHIMICA FISICA 3 (MOD. A)

(Titolare: Prof. GIORGIO MORO)

**Periodo:** IV anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:**

**Tipologie didattiche:** 24A 0,00 CFU

**Propedeuticità' :**

Chimica Fisica I e II

**Contenuto dell'attività formativa :**

A completamento della formazione chimico-fisica di base, vengono presentati i principi ed i metodi della termodinamica, della termodinamica statistica e della cinetica. Una consistente parte del corso è dedicata alle applicazioni con numerose sessioni di esercitazioni. Il corso è strutturato nei moduli:

Termodinamica

- 1) Grandezze di stato per sistemi all'equilibrio e principi della termodinamica.
- 2) Potenziali termodinamici per la determinazione dello stato di equilibrio.
- 3) Proprietà termodinamiche delle sostanze pure e loro transizioni di fase.
- 4) Proprietà termodinamiche delle soluzioni.
- 5) Equilibri di reazione.
- 6) Celle galvaniche.

Termodinamica Statistica

- 1) Probabilità e distribuzioni sugli stati.
- 2) Metodi statici per il calcolo di grandezze termodinamiche.
- 3) Applicazioni ai sistemi gassosi e liquidi.

Cinetica

- 1) Leggi generali della cinetica.
- 2) Processi elementari: teoria cinetica delle collisioni e dello stato di transizione

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta

**Testi di riferimento :**

P.W. Atkins, Physical Chemistry, (Oxford U.P., 6th

Ed., 1998). Saranno distribuite inoltre dispense di lezione. Il testo base è: P.W. Atkins, Physical Chemistry, (Oxford U.P., 6th Ed., 1998).

**Ausili didattici :**

Saranno distribuite inoltre dispense di lezione.

## CHIMICA FISICA 3 (MOD. B)

(Titolare: Prof. GIORGIO MORO)

**Periodo:** IV anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:**

**Tipologie didattiche:** 23A 0,00 CFU

**Propedeuticità' :**

Chimica Fisica I e II

**Contenuto dell'attività formativa :**

A completamento della formazione chimico-fisica di base, vengono presentati i principi ed i metodi della termodinamica, della termodinamica statistica e della cinetica. Una consistente parte del corso è dedicata alle applicazioni con numerose sessioni di esercitazioni. Il corso è strutturato nei moduli:

Termodinamica

- 1) Grandezze di stato per sistemi all'equilibrio e principi della termodinamica.
- 2) Potenziali termodinamici per la determinazione dello stato di equilibrio.
- 3) Proprietà termodinamiche delle sostanze pure e loro transizioni di fase.
- 4) Proprietà termodinamiche delle soluzioni.
- 5) Equilibri di reazione.
- 6) Celle galvaniche.

Termodinamica Statistica

- 1) Probabilità e distribuzioni sugli stati.
- 2) Metodi statici per il calcolo di grandezze termodinamiche.



3) Applicazioni ai sistemi gassosi e liquidi.

Cinetica

1) Leggi generali della cinetica.

2) Processi elementari: teoria cinetica delle collisioni e dello stato di transizione

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta

**Testi di riferimento :**

P.W. Atkins, *Physical Chemistry*, (Oxford U.P., 6th Ed., 1998).

**Ausili didattici :**

Saranno distribuite inoltre dispense di lezione.

## CHIMICA FISICA 3 (MOD. C)

(Titolare: Prof. GIORGIO MORO)

**Periodo:** IV anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:**

**Tipologie didattiche:** 23A 0,00 CFU

**Propedeuticità :**

Chimica Fisica I e II

**Contenuto dell'attività formativa :**

A completamento della formazione chimico-fisica di base, vengono presentati i principi ed i metodi della termodinamica, della termodinamica statistica e della cinetica. Una consistente parte del corso è dedicata alle applicazioni con numerose sessioni di esercitazioni. Il corso è strutturato nei moduli:

Termodinamica

1) Grandezze di stato per sistemi all'equilibrio e principi della termodinamica.

2) Potenziali termodinamici per la determinazione dello stato di equilibrio.

3) Proprietà termodinamiche delle sostanze pure e loro transizioni di fase.

4) Proprietà termodinamiche delle soluzioni.

5) Equilibri di reazione.

6) Celle galvaniche.

Termodinamica Statistica

1) Probabilità e distribuzioni sugli stati.

2) Metodi statici per il calcolo di grandezze termodinamiche.

3) Applicazioni ai sistemi gassosi e liquidi.

Cinetica

1) Leggi generali della cinetica.

2) Processi elementari: teoria cinetica delle collisioni e dello stato di transizione

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta

**Testi di riferimento :**

P.W. Atkins, *Physical Chemistry*, (Oxford U.P., 6th Ed., 1998).

**Ausili didattici :**

Saranno distribuite inoltre dispense di lezione.

## CHIMICA FISICA 4 (MOD. A)

(Titolare: Prof.ssa ALBERTA FERRARINI)

**Periodo:** V anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:**

**Tipologie didattiche:** 35A 0,00 CFU

**Obiettivi formativi :**

approfondimento di tematiche di Chimica Fisica di interesse generale e di livello avanzato che richiedono le conoscenze acquisite nei corsi di Chimica Fisica I, II, III.

**Contenuto dell'attività formativa :**

In questo modulo verrà presa in esame la risposta della materia a campi elettromagnetici, dal punto di vista macroscopico, utilizzando le leggi dell'elettromagnetismo classico e la teoria dei responsi lineari, e da quello molecolare, sviluppando i metodi quantomeccanici necessari per descrivere l'interazione molecolaradiazione

e per trattare problemi dipendenti dal tempo. La relazione tra i due livelli verrà stabilita facendo uso del formalismo della matrice densità. In particolare verranno sviluppati i seguenti argomenti:

- Equazioni di Maxwell ed equazioni costitutive dei materiali. Teoria dei responsi lineari (funzione risposta, suscettività complessa, relazioni di Kramers-Kronig,

esperimenti sull'asse dei tempi e su quello delle frequenze). Applicazioni:

propagazione di onde elettromagnetiche in mezzi otticamente inattivi

(assorbimento e rifrazione) ed attivi (dispersione ottica rotatoria e dicroismo circolare), rilassamento dielettrico, esperimenti di risonanza magnetica (a livello macroscopico).

- Equazione di Schrödinger dipendente dal tempo: visioni di Schrödinger, di Heisenberg e di Dirac. Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo.

Hamiltoniano di interazione tra molecola e radiazione: trattazione classica e quantistica. Applicazioni: probabilità di transizione, proprietà elettriche e magnetiche delle molecole (polarizzabilità, magnetizzabilità, potere ottico rotatorio).

- Matrice densità e sua evoluzione temporale. Proprietà di sistemi all'equilibrio in termini delle grandezze molecolari. Funzione risposta lineare a perturbazione

dipendente dal tempo: espressione quantistica e corrispondente funzione di correlazione classica. Applicazioni: spettroscopie elettronica e di risonanza magnetica, rilassamento dielettrico (interpretazione molecolare).

**Struttura della verifica di profitto :**

Orale

**Testi di riferimento :**

Testi di consultazione (disponibili nella biblioteca di Chimica): P.W. Atkins e R.S.

Friedman, *Molecular Quantum Mechanics* (Oxford U.P., 1997); J.M. Ziman, *Elements*

of *Advanced Quantum Theory* (Cambridge U.P., 1969); A. Hinchliffe e R.W. Munn,

*Molecular Electromagnetism* (Wiley, 1985).

**Ausili didattici :**

Materiale didattico verrà fornito agli studenti nel corso delle lezioni.

## CHIMICA FISICA 4 (MOD. B)

(Titolare: Prof. ARMANDO GENNARO)

**Periodo:** V anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:**

**Tipologie didattiche:** 35A 0,00 CFU

**Obiettivi formativi :**

approfondimento di tematiche di Chimica Fisica di interesse generale e di livello avanzato che richiedono le conoscenze acquisite nei corsi di Chimica Fisica I, II, III.

**Contenuto dell'attività formativa :**

In questo modulo verranno illustrati i processi di trasferimento elettronico, che costituiscono uno dei contributi essenziali ad una vasta gamma di processi chimici, biochimici e fotochimici.

- Teorie del trasferimento elettronico con particolare attenzione alle applicazioni elettrochimiche.

- Metodologie di indagine ed informazioni meccanicistiche in processi

elettrochimici organici.

- Trasferimento elettronico dissociativo.

- Processi di elettrosintesi.

**Struttura della verifica di profitto :**

Orale

**Descrizione verifica profitto :**

approfondimento di tematiche di Chimica Fisica di interesse generale e di livello avanzato che richiedono le conoscenze acquisite nei corsi di Chimica Fisica I, II, III.

**Testi di riferimento :**

Testi di consultazione (disponibili nella biblioteca di Chimica): P.W. Atkins e R.S.

Friedman, *Molecular Quantum Mechanics* (Oxford U.P., 1997); J.M. Ziman, *Elements*

of *Advanced Quantum Theory* (Cambridge U.P., 1969); A. Hinchliffe e R.W. Munn,

*Molecular Electromagnetism* (Wiley, 1985).

**Ausili didattici :**

Materiale didattico verrà fornito agli studenti nel corso delle lezioni.

## CHIMICA FISICA DEI FLUIDI (MOD. A)

(Titolare: Prof.ssa ALBERTA FERRARINI)

**Periodo:** 2 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:**

**Tipologie didattiche:** 25A+10E 0,00 CFU

**Obiettivi formativi :**

Argomento del corso saranno le proprietà chimico-fisiche di fluidi semplici e complessi in condizioni di equilibrio. Nel modulo A verranno presentati i metodi della termodinamica statistica, che stanno alla base delle teorie dei fluidi e delle tecniche di simulazione.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Termodinamica statistica:

Metodi probabilistici della termodinamica statistica (insiemi canonico e

microcanonico, funzione di partizione e grandezze termodinamiche).

Descrizione statistica dei fluidi (potenziali intermolecolari, funzioni di correlazione di coppia, equazione di stato, metodi sperimentali per la caratterizzazione della struttura dei fluidi).

Teorie perturbative e di campo medio (ruolo delle interazioni attrattive e di esclusione di volume, teoria del funzionale densità, approssimazione di van der Waals).

Fluttuazioni (teoria di Einstein delle fluttuazioni, stima delle fluttuazioni di grandezze termodinamiche).

**Struttura della verifica di profitto :**

Orale

**Descrizione verifica profitto :**

orale.

**Testi di riferimento :**

D. M. McQuarrie, "Statistical Thermodynamics", Harper and Row, 1976.

M. P. Allen e D. J. Tildesley, "Computer Simulation of Liquids", Clarendon, 1987.

## CHIMICA FISICA DEI FLUIDI (MOD. B)

(Titolare: Prof. GIORGIO MORO)

**Periodo:** 2 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 25A+10E 0,00 CFU

**Obiettivi formativi :**

Argomento del corso saranno le proprietà chimico-fisiche di fluidi semplici e complessi in condizioni di equilibrio. Nel modulo B verranno sviluppate le applicazioni che riguardano fluidi complessi, prendendo in esame anche sistemi di interesse biologico.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Fluidi semplici e complessi:

Tecniche di simulazione al computer (metodi Monte Carlo e di Dinamica Molecolare, loro applicazioni a fluidi atomici, molecolari ed ai sistemi macromolecolari).

Soluzioni di elettroliti (teorie di Poisson-Boltzmann e di Debye-Huckel, polielettroliti).

Tensione superficiale (descrizione termodinamica e statistica, teoria di van der Waals).

Solvatazione molecolare in fluidi polari e apolari.

Struttura di polimeri in soluzione (distribuzione conformazionale, modello gaussiano).

Cristalli liquidi (ordine molecolare, teorie di campo medio e di Onsager). Metodologie ed applicazioni computazionali per lo studio dei fluidi verranno illustrate con esercitazioni al computer.

**Struttura della verifica di profitto :**

Orale

**Testi di riferimento :**

D. M. McQuarrie, "Statistical Thermodynamics", Harper and Row, 1976.

M. P. Allen e D. J. Tildesley, "Computer Simulation of Liquids", Clarendon, 1987.

## CHIMICA FISICA DELLO STATO SOLIDO (MOD. A)

(Titolare: Prof. RENATO BOZIO)

**Periodo:** 1 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 25A+10E 0,00 CFU

**Obiettivi formativi :**

Il corso intende integrare la preparazione chimico-fisica dello studente in Chimica per quanto attiene al capitolo sullo stato solido che non può essere trattato adeguatamente nei corsi fondamentali di Chimica-Fisica. L'introduzione agli elementi fondamentali delle teorie interpretative utilizzate dalla Fisica dei solidi cristallini e finalizzata alla comprensione delle proprietà chimico-fisiche di alcuni tra i principali materiali di interesse tecnologico. Particolare attenzione è dedicata alla discussione della proprietà dei cristalli molecolari. La conoscenza delle proprietà di tale tipo di solidi, caratteristico dello stato solido organico, pone le basi per una migliore comprensione di importanti fenomeni quali il trasferimento di carica e la trasformazione di energia sia in materiali per applicazioni tecnologiche che nei sistemi di interesse biologico.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Classificazione empirica dei solidi: Solidi amorfi e cristallini. Cristalli molecolari, covalenti, ionici e metallici.

Energia reticolare nei cristalli ionici: Costante di Madelung. Metodo di Evjen per il calcolo della costante di Madelung.

Proprietà di simmetria dei cristalli: Simmetria traslazionale nei solidi cristallini.

Proprietà di Bravais in due dimensioni. Gruppi puntuali e gruppi spaziali in due dimensioni.

Reticoli di Bravais, gruppi puntuali e gruppi spaziali per cristalli tridimensionali. Celle di Wigner-Seitz. Piani e direzioni cristalline. Indice di Miller.

Strutture cristalline tipiche. Diffrazione della radiazione da parte di un reticolo cristallino. Legge di diffrazione di Bragg. Equazioni di diffrazione di Von Laue. Reticolo reciproco e sue proprietà. Fattore di scattering atomico. Fattore di struttura geometrica. Metodi sperimentali di diffrazione a raggi X. Dinamica reticolare. Equazioni di dispersione per una catena lineare monoatomica nella approssimazione armonica. Condizioni di Born Von Karman. Prima zona di Brillouin. Caso della catena lineare biatomica. Rappresentazione a zona ridotta e a zona estesa. Vibrazioni di reticoli tridimensionali con base poliatomica. Cristalli molecolari. Trattamento quantomeccanico. Fononi. Calore specifico reticolare. Modello di Einstein. Funzione densità di stati. Modelli di Debye. Scattering neutronico anelastico. Leggi di conservazione dell'energia e del momento cristallino. Metodi sperimentali. Scattering anelastico dei fotoni. Struttura elettronica dei metalli. Approssimazione monoelettronica e teorema di Bloch. Struttura elettronica a bande. Metodo tight binding (LCAO). Metodo degli elettroni quasi liberi. Dinamica degli elettroni nella approssimazione semiclassica. Massa effettiva. Elettroni e buchi. Statistica di Fermi degli elettroni. Calore specifico elettronico. Paramagnetismo di Pauli. Semiconduttori: Semiconduzione intrinseca ed estrinseca. Livelli localizzati di impurezze. Eccitazione termica dei trasportatori di carica. Semiconduttori di tipo n e tipo p. Conduttività elettrica. Effetto Hall. Giunzione p-n. Forze intermolecolari a corto e lungo raggio. Interazioni elettrostatiche, polarizzazione e dispersione. Potenziali empirici atomo-atomo. Strutture di equilibrio ed energie reticolari nei cristalli molecolari. Eccitoni nei cristalli molecolari: interazione di risonanza in un modello a due molecole. Cenni della teoria dei gruppi spaziali applicata ai cristalli molecolari. Simmetria di eccitoni nei cristalli molecolari: interazione di risonanza in un modello a due molecole. Cenni della teoria dei gruppi spaziali applicata ai cristalli molecolari. Simmetria di sito. Rappresentazioni irriducibili del gruppo di traslazione. Analisi secondo il gruppo fattore. Eccitoni di Frenkel nei cristalli perfetti. Probabilità di transizione e regole di selezione. Modello del gas orientato. Spettri di assorbimento elettronico di cristalli molecolari aromatici.

#### **Struttura della verifica di profitto :**

Scritta

#### **Testi di riferimento :**

C. Kittel, "Introduction to Solid Physics", quinta edizione (John Wiley, New York, 1976).

H.E. Hall, "Solid State Physics" (John Wiley, London, 1974)

#### **Ausili didattici :**

Specie per quanto riguarda gli argomenti speciali, questi testi verranno integrati da appunti di lezione.

Altri testi di utile consultazione:

N.W. Ashcroft e N.D. Mermin, "Solid State Physics" (Holt, Rinehart and Winston, New York, 1976)

J.M. Ziman, "I Principi della Teoria dei Solidi" (Tamburini, Milano, 1975).

## **CHIMICA FISICA DELLO STATO SOLIDO (MOD. B)**

(Titolare: Prof.ssa CAMILLA FERRANTE)

**Periodo:** 1 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 25A+10E 0,00 CFU

#### **Obiettivi formativi :**

Il corso intende integrare la preparazione chimico-fisica dello studente in Chimica per quanto attiene al capitolo sullo stato solido che non può essere trattato adeguatamente nei corsi fondamentali di Chimica-Fisica. L'introduzione agli elementi fondamentali delle teorie interpretative utilizzate dalla Fisica dei solidi cristallini e finalizzata alla comprensione delle proprietà chimico-fisiche di alcuni tra i principali materiali di interesse tecnologico. Particolare attenzione è dedicata alla discussione della proprietà dei cristalli molecolari. La conoscenza delle proprietà di tale tipo di solidi, caratteristico dello stato solido organico, pone le basi per una migliore comprensione di importanti fenomeni quali il trasferimento di carica e la trasformazione di energia sia in materiali per applicazioni tecnologiche che nei sistemi di interesse biologico.

#### **Contenuto dell'attività formativa :**

Classificazione empirica dei solidi: Solidi amorfi e cristallini. Cristalli molecolari, covalenti, ionici e metallici. Energia reticolare nei cristalli ionici: Costante di Madelung. Metodo di Evjen per il calcolo della costante di Madelung. Proprietà di simmetria dei cristalli: Simmetria traslazionale nei solidi cristallini. Proprietà di Bravais in due dimensioni. Gruppi puntuali e gruppi spaziali in due dimensioni. Reticoli di Bravais, gruppi puntuali e gruppi spaziali per cristalli

tridimensionali. Celle di Wigner-Seitz. Piani e direzioni cristalline. Indice di Miller. Strutture cristalline tipiche. Diffrazione della radiazione da parte di un reticolo cristallino. Legge di diffrazione di Bragg. Equazioni di diffrazione di Von Laue. Reticolo reciproco e sue proprietà. Fattore di scattering atomico. Fattore di struttura geometrica. Metodi sperimentali di diffrazione a raggi X. Dinamica reticolare. Equazioni di dispersione per una catena lineare monoatomica nella approssimazione armonica. Condizioni di Born Von Karman. Prima zona di Brillouin. Caso della catena lineare biatomica. Rappresentazione a zona ridotta e a zona estesa. Vibrazioni di reticoli tridimensionali con base poliatomica. Cristalli molecolari. Trattamento quantomeccanico. Fononi. Calore specifico reticolare. Modello di Einstein. Funzione densità di stati. Modelli di Debye. Scattering neutronico anelastico. Leggi di conservazione dell'energia e del momento cristallino. Metodi sperimentali. Scattering anelastico dei fotoni. Struttura elettronica dei metalli. Approssimazione monoelettronica e teorema di Bloch. Struttura elettronica a bande. Metodo tight binding (LCAO). Metodo degli elettroni quasi liberi. Dinamica degli elettroni nella approssimazione semiclassica. Massa effettiva. Elettroni e buchi. Statistica di Fermi degli elettroni. Calore specifico elettronico. Paramagnetismo di Pauli. Semiconduttori: Semiconduzione intrinseca ed estrinseca. Livelli localizzati di impurezze. Eccitazione termica dei trasportatori di carica. Semiconduttori di tipo n e tipo p. Conducibilità elettrica. Effetto Hall. Giunzione p-n. Forze intermolecolari a corto e lungo raggio. Interazioni elettrostatiche, polarizzazione e dispersione. Potenziali empirici atomo-atomo. Strutture di equilibrio ed energie reticolari nei cristalli molecolari. Eccitoni nei cristalli molecolari: interazione di risonanza in un modello a due molecole. Cenni della teoria dei gruppi spaziali applicata ai cristalli molecolari. Simmetria di eccitoni nei cristalli molecolari: interazione di risonanza in un modello a due molecole. Cenni della teoria dei gruppi spaziali applicata ai cristalli molecolari. Simmetria di sito. Rappresentazioni irriducibili del gruppo di traslazione. Analisi secondo il gruppo fattore. Eccitoni di Frenkel nei cristalli perfetti. Probabilità di transizione e regole di selezione. Modello del gas orientato. Spettri di assorbimento elettronico di cristalli molecolari aromatici.

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta

**Testi di riferimento :**

C. Kittel, "Introduction to Solid Physics", quinta edizione (John Wiley, New York, 1976).

H.E. Hall, "Solid State Physics" (John Wiley, London, 1974)

**Ausili didattici :**

Specie per quanto riguarda gli argomenti speciali, questi testi verranno integrati da appunti di lezione.

Altri testi di utile consultazione:

N.W. Ashcroft e N.D. Mermin, "Solid State Physics" (Holt, Rinehart and Winston, New York, 1976)

J.M. Ziman, "I Principi della Teoria dei Solidi" (Tamburini, Milano, 1975).

## CHIMICA FISICA ORGANICA (MOD. A)

(Titolare: Prof. GIORGIO GENNARI)

**Periodo:** 1 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 25A+10E 0,00 CFU

**Propedeuticità' :**

è consigliabile che gli studenti interessati abbiano seguito un corso di Spettroscopia.

**Obiettivi formativi :**

il corso si propone di fornire agli studenti di Chimica le nozioni fondamentali sulla formazione, sulla struttura e sulla reattività delle molecole organiche elettronicamente eccitate (modulo A) e dei radicali organici (modulo B).

**Contenuto dell'attività formativa :**

Fotochimica Organica

- Teoria delle transizioni tra stati elettronici delle molecole organiche.
- Proprietà chimico-fisiche degli stati eccitati di singoletto e di tripletto
- Processi fotofisici di disattivazione degli stati elettronicamente eccitati
- Tecniche spettroscopiche di assorbimento e di emissione UV-VIS.
- Metodi di determinazione delle costanti cinetiche dei processi chimico-fisici delle molecole eccitate
- Processi di trasferimento di energia
- Determinazione del pKa degli stati elettronici eccitati
- Esempi di fotoreazioni: fotoisomerizzazione, fotochimica del carbonile, fotoriduzione, fotodimerizzazione, fotosolfonazione, fotoclorurazione e fotobromurazione, fotonitrosazione, fotoossidazione sensibilizzata.

– Aspetti fotochimici del fenomeno della visione.

**Struttura della verifica di profitto :**

Orale

**Descrizione verifica profitto :**

l'accertamento della preparazione sulla materia del corso verrà svolto mediante esame orale.

**Testi di riferimento :**

Testo adottato: dispense a cura dei titolari.

Testi consigliati:

A.Gilbert and J.Baggot, "Essentials of Molecular Photochemistry", Blackwell Sci. Publ., Oxford.

N.M. Atherton, "Electron Spin Resonance – Theory and Applications", J.Wiley, ed. Chichester.

R.H. Clarke, "Triplet State ODMR Spectroscopy", J.Wiley&Sons, ed. Chichester.

---

## CHIMICA FISICA ORGANICA (MOD. B)

(Titolare: Dott. GIANCARLO AGOSTINI)

**Periodo:** 1 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 25A+10E 0,00 CFU

**Propedeuticità' :**

è consigliabile che gli studenti interessati abbiano seguito un corso di Spettroscopia.

**Obiettivi formativi :**

il corso si propone di fornire agli studenti di Chimica le nozioni fondamentali sulla formazione, sulla struttura e sulla reattività delle molecole organiche elettronicamente eccitate (modulo A) e dei radicali organici (modulo B).

**Contenuto dell'attività formativa :**

Spettroscopia Magnetica e Magneto-Ottica

Applicazioni della Risonanza di Spin Elettronico (ESR) alla chimica organica:

– Studio di radicali organici e biradicali in sistemi supramolecolari con tecnica ESR ad alto campo magnetico. Interpretazione dello spettro ESR. Interazioni magnetiche isotrope e anisotrope.

– Caratterizzazione degli stati eccitati di tripletto di sistemi di interesse biologico con tecnica ESR ad alto campo magnetico e a campo zero, con rivelazione ottica (ZF-ODMR). Analisi della polarizzazione di spin. Dinamica della popolazione di spin dei tre sottolivelli di tripletto. Studio di spettri ESR risolti nel tempo.

– Strumentazione .

**Struttura della verifica di profitto :**

Orale

**Descrizione verifica profitto :**

l'accertamento della preparazione sulla materia del corso verrà svolto mediante esame orale.

**Testi di riferimento :**

Testo adottato: dispense a cura dei titolari.

Testi consigliati:

A.Gilbert and J.Baggot, "Essentials of Molecular Photochemistry", Blackwell Sci. Publ., Oxford.

N.M. Atherton, "Electron Spin Resonance – Theory and Applications", J.Wiley, ed. Chichester.

R.H. Clarke, "Triplet State ODMR Spectroscopy", J.Wiley&Sons, ed. Chichester.

---

## CHIMICA INORGANICA 1

(Titolare: da definire) - Mutuato da: Laurea di primo livello in Chimica

**Periodo:** III anno, 2 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 70A 0,00 CFU

**Obiettivi formativi :**

il corso intende dare una visione completa delle proprietà degli elementi e dei loro composti principali. Accanto agli aspetti sintetici saranno illustrati gli aspetti più significativi della loro reattività in soluzione.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Il legame chimico. Il legame ionico nelle molecole e nei cristalli. Il legame covalente secondo i metodi del legame di valenza e dell'orbitale molecolare. Le molecole biatomiche omo- ed eteronucleari. Il legame nei composti di coordinazione. Molecole poliatomiche: relazioni tra geometria e struttura elettronica.

Chimica degli elementi di non transizione. Saranno ripresi ed approfonditi i concetti già illustrati nel corso di Chimica Generale ed

Inorganica con particolare riguardo a: proprietà periodiche degli elementi, variazioni di proprietà all'interno di un gruppo, sintesi e reattività degli elementi e dei composti più comuni (come, ad es., idruri, ossidi, alogenuri, ossiacidi, composti metallorganici). Introduzione agli elementi di transizione. Proprietà generali degli elementi del «blocco d» e del «blocco f». Le caratteristiche delle tre serie di transizione d. La configurazione elettronica degli atomi e degli ioni. I complessi di metalli di transizione. La teoria del campo cristallino con applicazioni ai poliedri di coordinazione a simmetria Oh, Td e D4h. Cenni di teoria dell'orbitale molecolare applicata a complessi ottaedrici.

La chimica degli elementi dei «blocchi d» con particolare riferimento alle proprietà di gruppo, alle proprietà chimico-fisiche dei principali elementi, ai loro metodi di

preparazione, alla stabilità e reattività dei composti più significativi anche nei diversi stati di ossidazione.

Generalità sulla chimica dei lantanidi ed attinidi.

Leganti di tipo sigma e pi greco. Composti metallocarbonili e metallo-olefine.

Cenni sulla reattività dei composti degli elementi di transizione e sulla loro attività catalitica.

**Struttura della verifica di profitto :**

Orale

**Descrizione verifica profitto :**

esame orale

**Testi di riferimento :**

A.G. Sharpe, "Inorganic Chemistry", 3rd Ed., Longman, 1992.

D.F. Shriver, P.W. Atkins, "Inorganic Chemistry", 3rd Ed., Oxford, University Press, 1999.

**Ausili didattici :**

Appunti di lezione.

## CHIMICA INORGANICA 2

(Titolare: Prof. EUGENIO TONDELLO)

**Periodo:** IV anno, 2 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:**

**Tipologie didattiche:** 70A 0,00 CFU

**Prerequisiti :**

si richiede la conoscenza degli argomenti trattati nei corsi di Chimica Inorganica I e di Chimica Fisica I e II e di Chimica Organica I.

**Obiettivi formativi :**

il corso intende sviluppare, attraverso la combinazione di modelli teorici e di metodologie di sintesi e di caratterizzazione specifiche, la conoscenza delle proprietà chimiche e fisiche delle molecole o ioni inorganici verso i sistemi nano- e mesodimensionali: cluster, fili, strati. Composizione elementare, struttura elettronica ed architettura molecolare sono messe in relazione con la variazione di comportamento chimico del sistema a passare dalla molecola agli aggregati molecolari.

**Contenuto dell'attività formativa :**

I livelli energetici elettronici degli atomi e in campo di potenziale esterno. La simmetria e la forza del campo: dalla perturbazione alla ionizzazione. Le teorie del campo cristallino e del campo dei leganti. Campo debole e campo forte. I diagrammi di Tanabe-Sugano. Le serie spettrochimica e nefeloauxetica. Il modello "Angular

Overlap". La teoria degli orbitali molecolari e il legame tra atomi metallici e leganti.

L'accoppiamento spin-orbita. La struttura elettronica e le proprietà degli ioni degli elementi di transizioni: energia, poliedri di coordinazione, transizioni elettroniche e spettri di assorbimento, magnetismo, reattività chimica. I tipi fondamentali di composti di coordinazione e metallorganici con proprietà ottiche, fotocromiche, luminescenti e di ottica non lineare. I composti molecolari magnetici.

Il legame elemento-elemento e la concatenazione. I grappoli (cluster) monoelementari Mn e le proprietà al crescere di n: numeri magici e stabilità, livelli energetici e proprietà. Le caratteristiche degli atomi di superficie (di vertice, di spigolo, di faccia)

e interni. Esempi di variazione della reattività chimica dei grappoli di metalli dei gruppi 1 e 11 : Lin e Aun con n= 1, 2,...9. I grappoli in fase gassosa e in fasi condensate. I metodi di sintesi chimica e chimico-fisica: metodi diretti e da precursori molecolari. I precursori metallorganici nella sintesi di grappoli isolati. I leganti idonei

a stabilizzare il guscio degli atomi esterni del grappolo. I grappoli supportati esternamente (outside cluster) e la catalisi chimica, i grappoli supportati nella matrice

(inside cluster) e le proprietà ottiche, fotoniche e magnetiche.

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta

**Testi di riferimento :**

Testi consigliati: per ogni argomento sviluppato verrà fornito allo studente la necessaria bibliografia a corredo degli appunti di lezione.

## CHIMICA INORGANICA 3 (MOD. A)

(Titolare: Prof. GAETANO GRANOZZI)

**Periodo:** V anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:**

**Tipologie didattiche:** 35A 0,00 CFU

**Prerequisiti :**

é necessario aver frequentato *Chimica Inorganica I e II* e *Chimica Organica*.

**Obiettivi formativi :**

questo modulo intende fornire una trattazione di base della struttura e cristallografica dei solidi e delle superfici finalizzata alla trattazione modellistica dei processi catalitici in fase eterogenea.

**Contenuto dell'attività formativa :**

## 1) Richiami di struttura dei solidi

Reticoli e strutture inorganiche di rilevanza in campo catalitico. Concetti di base di cristallografica.

## 2) Struttura delle Interfasi

Importanza tecnologica delle interfasi. Cenni storici sulla Surface Science. Strati sottili. Energia interfacciale. Solidi dispersi e area superficiale. Bordi di grano. Interfase solido-vuoto: Superfici ideali. Rilassamento e ricostruzioni superficiali. Notazioni sulle ricostruzioni di superficie. Cristallografia di superficie: reticolo diretto e reciproco. Metodologie per lo studio strutturale delle superfici. Superfici reali. Difetti superficiali e di bulk. Rugosità e morfologia di superficie. Atomic Force Microscopy (AFM). Effetto tunnel e Scanning Tunneling Microscopy (STM). Interfase solido-gas: Sticking coefficient. Calcolo del tempo di vita medio di una superficie pulita. Porosità. Chemisorbimento e fisisorbimento. Desorbimento. Interazioni interadsorbato. Isoterme di adsorbimento. Interfase solido-solido: Epitassia. Meccanismi di crescita degli strati sottili e processi elementari atomici connessi.

## 3) Dinamica delle superfici

Mobilità delle specie adsorbite. Cinetica delle reazioni in superficie. Paragone tra reazioni in fase omogenea ed eterogenea. Esame di alcune reazioni superficiali.

**Struttura della verifica di profitto :**

Orale

**Descrizione verifica profitto :**

esame orale.

**Testi di riferimento :**

- Inorganic Chemistry*, Shriver and Atkins, Oxford University Press, 1999, 3rd edition.
- Concepts and Models of Inorganic Chemistry*, B. Douglas, D. McDaniel, J. Alexander, John Wiley & Sons, 1994, 3rd edition
- Principles and practice of heterogeneous catalysis*, J.M. Thomas and W.J. Thomas, 1997, VCH Editions.

**Ausili didattici :**

- Dispensa: G. Granozzi, *Chimica dello Stato Solido e delle Superfici*, CLEUP, 1999.

---

**CHIMICA INORGANICA 3 (MOD. B)**

(Titolare: Prof. LUCIANO PANDOLFO)

**Periodo:** V anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:**

**Tipologie didattiche:** 35A 0,00 CFU

**Prerequisiti :**

é necessario aver frequentato *Chimica Inorganica I e II* e *Chimica Organica*.

**Obiettivi formativi :**

comprensione dei fenomeni fondamentali coinvolti nella catalisi eterogenea attraverso la descrizione di alcune reazioni e sistemi catalitici. Confronto con processi di catalisi omogenea.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Introduzione alla catalisi eterogenea: definizione del fenomeno; gli stadi fondamentali del processo catalitico eterogeneo; analogie e differenze con alcune reazioni fondamentali inorganiche in fase omogenea.

I componenti dei catalizzatori eterogenei: fasi attive; supporti; promotori.

Materiali inorganici di rilevanza in catalisi eterogenea: carbone; ossidi e solfuri; alluminosilicati e zeoliti; metalli.

Funzionalità dei catalizzatori eterogenei: reazioni redox; reazioni acido-base.

Fenomeni di trasporto di massa nei catalizzatori eterogenei.

Disattivazione e rigenerazione dei catalizzatori eterogenei.

Preparazione dei catalizzatori eterogenei.

Catalisi su zeoliti e zeotipi: sintesi delle zeoliti; controllo dell'acidità e della struttura microporosa delle zeoliti; cracking degli idrocarburi e alchilazioni: selettività di forma; ossidazioni benigne per l'ambiente: attivazione del perossido di idrogeno su titaniosilicalite (TS1).

Catalisi eterogenea su ossidi: reazioni di disidratazione su allumina; reazioni di alcheni su ossido di zinco.

Catalisi eterogenea su metalli supportati: ossidazione dell'etene a ossirano;



ammossidazione del propene ad acrilonitrile; reforming catalitico: catalisi bifunzionale; abbattimento di agenti inquinanti prodotti dagli autoveicoli: marmitte catalitiche.

**Struttura della verifica di profitto :**

Orale

**Descrizione verifica profitto :**

esame orale.

## CHIMICA ORGANICA 2

(Titolare: Prof. RANIERO ROCCHI)

**Periodo:** III anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:**

**Tipologie didattiche:** 48A 0,00 CFU

**Prerequisiti :**

quelli relativi alla propedeuticità.

**Propedeuticità' :**

Chimica organica I.

**Obiettivi formativi :**

il corso riguarda essenzialmente la chimica degli acidi carbossilici e loro derivati, dei principali composti polifunzionali e polinucleari e di alcuni composti eterociclici e si propone di illustrare i principali metodi di sintesi, le caratteristiche fondamentali ed i derivati più importanti dei composti maggiormente rappresentativi.

Vengono inoltre illustrate le principali caratteristiche dei carboidrati e dei polipeptidi.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Acidi carbossilici, sintesi e proprietà chimiche. Derivati degli acidi carbossilici.

Idrolisi di esteri ed ammidi. Scala di reattività dei reattivi acilanti. Reazione di Hell Volhard-Zelinski. Degradazione di Hoffmann. Dioli, cis e trans ossidrilazione di

alcheni. Idrolisi di epossidi. Pinnacoli e riduzioni monoelettroniche. Reazione con acido periodico. Glicerolo e polialcoli. Fosfolipidi.

Grassi, saponi e detergenti.

Trasposizione e deamminazione pinacolica. Esempi di reazioni di trasposizione anionotropica 1,2 (trasposizioni C-C, C-N e C-O).

Assistenza anchimerica: effetti stereochimici e cinetici. Trasposizione benzidinica e trasposizione benzilica. Acidi bicarbossilici alifatici ed aromatici. Acido ossalico ed acido succinico. Anidridi ed

immidi cicliche. N-Bromosuccinimide. Acido maleico e acido fumarico. Estere malonico e sintesi maloniche. Acido piruvico. Chetoacidi.

Estere acetacetico, sintesi di Claisen e sintesi dal dichetene. Sintesi acetetiche, sintesi di eterocicli. Altri metodi di alfa alchilazione di

acidi e chetoni (metodo di Meyers, enammine,

alchilborani). Composti bicarbonilici, glicosale ed alfa-dichetoni. Benzile, condensazione benzoinica, condensazione aciloinica, ditiani.

Beta dichetoni. Sintesi e proprietà chimiche. Sintesi e reattività di composti carbonilici alfa-beta insaturi.

Sintesi di Knoevenagel, sintesi di Perkin. Reazione di Michael, anulazione di Robinson. Chinoni. Ossiacidi alifatici e aromatici, effetto

orto. Derivati dell'acido carbonico: fosgene, cianammide, urea e derivati. Diazometano, carbeni, solfuro di carbonio, tetracloruro di

carbonio. Sintesi e proprietà di alfa-ammino acidi.

Polipeptidi, sintesi in soluzione ed in fase solida. Proteine, struttura I, II, III e IV.

Carboidrati, fotosintesi clorofilliana. Struttura e principali proprietà dei carboidrati.

Stereochimica, serie steriche, osazoni, reazione di Kiliani-Fisher, ossidazione e riduzione, dimensioni dell'anello, idrolisi dei glucosidi.

Alcuni esempi di mono-, di- e polisaccaridi. Sistemi polinucleari ad anelli non condensati: bifenile, bifenilmetano,

trifenilmetano. Naftaline sintesi e reattività. Azulene, ione tropilio. Antracene e fenantrene. Composti eterociclici e loro derivati

(nomenclatura, principali composti eterociclici con uno e con due eteroatomi, pirrolo, furano, tiofene, diazoli, ossazolo e

tiazolo, piridina, diazine, chinolina e isochinolina, indolo, purina). Cenni sui composti organici dello zolfo, del silicio e del fosforo.

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta

**Descrizione verifica profitto :**

l'esame è congiunto con quello del corso di Laboratorio di chimica

organica II. Durante lo svolgimento del corso sono effettuati accertamenti periodici

mediante compiti scritti con domande a scelta multipla che includono tests di

comprensione di quanto svolto nel corso parallelo di laboratorio. In carenza, o

insufficienza, degli accertamenti periodici è previsto un accertamento finale in forma

orale.

**Testi di riferimento :**

K. Peter, P. Wollhardt, N.E. Shore, "Chimica organica", Ed. Zanichelli.

L.A.D. Baker e R. Engel, "Chimica organica", Ed. Ambrosiana.

## CHIMICA ORGANICA 3 (MOD. A)

(Titolare: Prof.ssa GIULIA MARINA LICINI)

**Periodo:** IV anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:**

**Tipologie didattiche:** 35A 0,00 CFU

**Propedeuticità' :**

lo studente deve aver superato gli esami di Chimica Organica I e II

**Obiettivi formativi :**

Il corso è inteso a completare le conoscenze di base della Chimica Organica che lo studente ha acquisito nel triennio e che sono ritenute indispensabili per il percorso di laurea in Chimica, indipendentemente dall'indirizzo scelto per il biennio.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Stereochimica. Concetti di simmetria e gruppi puntuali. Relazioni di isomeria e topicità, chiralità e stereogenicità, prochiralità e prostereogenicità, descrittori di configurazione. Racemi e loro proprietà. Racemizzazione. Determinazione della purezza stereoisomerica. Separazione di enantiomeri.

Reazioni fondamentali delle molecole organiche. Sostituzioni nucleofile (SN1, SN2), carbocationi, nucleofilicità, effetto solvente, gruppi uscenti, effetti sterici e del sostituente, aspetti stereochimici.

Addizioni ed eliminazioni (E1, E2, E1cb). Effetti di orientamento, effetti sterici e aspetti stereochimici.

Carbanioni ed altri nucleofili. Reazioni dei composti carbonilici: addizioni e stereochimica dell'addizione. Ossidazioni e riduzioni.

Addizioni concertate. Reazioni pericicliche: elettrocicliche, sigmatropiche, cicloaddizioni, cicloaddizioni 1,3-dipolari, chelotropiche.

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta, Orale

**Descrizione verifica profitto :**

scritto/orale.

**Testi di riferimento :**

F.A.Carey and R.J. Sundberg, "Advanced Organic Chemistry" (third edition), Plenum Press, 1990.

H. Dugas, "Bioorganic Chemistry" (third edition), Springer Verlag, 1996.

**Ausili didattici :**

Appunti di lezione

---

**CHIMICA ORGANICA 3 (MOD. B)**

(Titolare: Prof. CLAUDIO TONIOLO)

**Periodo:** IV anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:**

**Tipologie didattiche:** 35A 0,00 CFU

**Propedeuticità' :**

lo studente deve aver superato gli esami di Chimica Organica I e II

**Obiettivi formativi :**

Il corso è inteso a completare le conoscenze di base della Chimica Organica che lo studente ha acquisito nel triennio e che sono ritenute indispensabili per il percorso di laurea in Chimica, indipendentemente dall'indirizzo scelto per il biennio.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Complessi "host-guest". Eteri corona. Riconoscimenti molecolare e chirale, catalisi e trasporto. Ionofori naturali (peptidi, eteri, esteri) e sintetici. Cavitandi e calixareni.

Membrane e micelle. Polimeri sintetici come modelli enzimatici. Ciclodestrine.

Modelli enzimatici su base steroidea. Rotaxani e catenani. Capsule molecolari.

Sistemi auto-replicanti. Recettori per anioni. Nanotubi peptidici. Dendrimeri.

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta, Orale

**Descrizione verifica profitto :**

scritto/orale.

**Testi di riferimento :**

F.A.Carey and R.J. Sundberg, "Advanced Organic Chemistry" (third edition), Plenum Press, 1990.

H. Dugas, "Bioorganic Chemistry" (third edition), Springer Verlag, 1996.

**Ausili didattici :**

Appunti di lezione

---

**CHIMICA ORGANICA 4**

(Titolare: Prof. ALESSANDRO BAGNO)

**Periodo:** V anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:**

**Tipologie didattiche:** 70A 0,00 CFU

**Prerequisiti :**

nozioni di base di termodinamica e chimica organica.

**Propedeuticità' :**

Chimica Organica I, II, e III.

**Obiettivi formativi :**

Il corso intende approfondire alcuni aspetti importanti della Chimica Organica e

fornire gli strumenti concettuali di base per lo studio dei meccanismi delle reazioni organiche.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Meccanismi dei processi elementari. Teoria dello stato di transizione. Teoria delle velocità assolute. Principio della reversibilità microscopica. Postulato di Hammond.

Determinazione delle leggi cinetiche. Effetto isotopico.

Correlazioni lineari di energia libera. Correlazioni tra parametri cinetici e termodinamici di reazioni organiche.

Le reazioni in soluzione. Effetto del solvente e correlazioni tra struttura e parametri caratterizzanti il mezzo di reazione. Idratazione idrofobica.

Acidi e basi. Equilibri e reazioni in soluzioni fortemente acide e basiche, e in fase gassosa. Catalisi acida e basica. Sito di protonazione di molecole polifunzionali.

Meccanismi di alcuni tipi di reazioni organiche: reazioni di eliminazione e reazioni pericicliche.

Applicazioni della chimica computazionale a problemi di chimica organica.

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta

**Descrizione verifica profitto :**

l'esame potrà svolgersi anche attraverso periodici accertamenti scritti su sezioni concordate del programma.

**Testi di riferimento :**

F. A. Carey, R. J. Sundberg: *Advanced Organic Chemistry*, Plenum Publ. Co., IV ed., 2000.

<http://www.wkap.nl>

H. Maskill: *Structure and Reactivity in Organic Chemistry*, Oxford University Press, 1999. <http://www.oup.co.uk/isbn/0-19-855820-1>

N. Isaacs: *Physical Organic Chemistry*, Longman Scientific & Technical, II ed., 1995.

<http://www.pearsoneduc.com>

**Ausili didattici :**

Appunti e dispense di lezione.

## CHIMICA TEORICA (MOD. A)

(Titolare: Prof.ssa MARIA GABRIELLA SEVERIN)

**Periodo:** 2 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 25A+10E 0,00 CFU

**Propedeuticità' :**

Chimica Fisica I e Chimica Fisica II.

**Obiettivi formativi :**

il corso è suddiviso in due moduli con un numero equivalente di ore (25+25), concernenti i metodi e le applicazioni della chimica quantistica computazionale (modulo A) e la descrizione su base molecolare della dinamica nelle fasi condensate (modulo B).

L'utilizzazione delle diverse metodologie sarà esemplificata mediante esercitazioni al calcolatore.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Il modulo A è dedicato all'applicazione di metodologie computazionali per il calcolo di strutture elettroniche e di proprietà elettriche e magnetiche di molecole in vacuo ed

in soluzione. Le specifiche tematiche sono: A1) metodi tradizionali di calcolo di strutture elettroniche (Hartree-Fock, metodi semiempirici); A2) metodi multiconfigurazionali e multi-reference che tengano conto della correlazione elettronica; A3) calcoli di stati elettronici eccitati e di responsi molecolari dipendenti dal tempo per la valutazione di proprietà spettroscopiche; A4) descrizione dei fenomeni di solvatazione secondo la teoria del campo di reazione.

**Struttura della verifica di profitto :**

Orale

**Descrizione verifica profitto :**

Esame orale

**Testi di riferimento :**

Testo adottato: dispense di lezione

Testi consigliati: D.A. McQuarrie, "Statistical Mechanics", Harper and Row, 1976.;

R. McWeeny, "Methods of Molecular Quantum Mechanics", Academic Press, 1989.

## CHIMICA TEORICA (MOD. B)

(Titolare: Prof. ANTONINO POLIMENO)

**Periodo:** 2 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 25A+10E 0,00 CFU

**Propedeuticità' :**

Chimica Fisica I e Chimica Fisica II.

**Obiettivi formativi :**

il corso è suddiviso in due moduli con un numero equivalente di ore (25+25), concernenti i metodi e le applicazioni della chimica quantistica computazionale (modulo A) e la descrizione su base molecolare della dinamica nelle fasi condensate (modulo B).

L'utilizzazione delle diverse metodologie sarà esemplificata mediante esercitazioni al calcolatore.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Nel modulo B vengono introdotti i metodi teorici necessari per descrivere i processi molecolari nelle fasi condensate, assieme alla loro applicazione per l'interpretazione delle misure spettroscopiche. Le specifiche tematiche sono: B1) introduzione alla descrizione probabilistica dei moti molecolari e funzioni di correlazione; B2) metodi classici esatti ed approssimati per lo studio di dinamiche molecolari roto-traslazionali in fasi condensate; B3) introduzione alla teoria dei responsi lineari; B4) interpretazione delle misure spettroscopiche e dei tempi di rilassamento; B5) modelli

per l'interpretazione dei processi cinetici attivati in fasi condensate.

**Struttura della verifica di profitto :**

Orale

**Testi di riferimento :**

Testo adottato: dispense di lezione

Testi consigliati: D.A. McQuarrie, "Statistical Mechanics", Harper and Row, 1976.;

R. McWeeny, "Methods of Molecular Quantum Mechanics", Academic Press, 1989.

---

## CINETICA CHIMICA E DINAMICA MOLECOLARE

(Titolare: Prof. ALBERTO CECCON)

**Periodo:** 2 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 50A+20E 0,00 CFU

**Obiettivi formativi :**

Lo scopo del corso è di presentare, in termini ragionevolmente ristretti, i fatti e le teorie più importanti che riguardano la velocità delle reazioni chimiche. Particolare interesse viene rivolto alle reazioni che hanno luogo in fase liquida. Il corso è rivolto agli studenti che abbiano familiarità con i principi fondamentali della Termodinamica nonché della Chimica Inorganica e Organica. Il corso risulta necessario soprattutto per coloro che sono interessati allo studio dei meccanismi di reazione in chimica organica e inorganica nonché allo studio dei fenomeni catalitici.

**Contenuto dell'attività formativa :**

1a Parte

Velocità di reazione. Semplici espressioni della velocità. Reazioni semplici e complesse. Ipotesi dello stato stazionario. Energia di attivazione. Metodi sperimentali per la caratterizzazione di sistemi cinetici. Teoria delle collisioni. Teoria dello stato di transizione. Applicazione delle teorie a sistemi gassosi. Reazioni veloci.

2 a Parte

Reazioni in soluzione. Effetto solvente sulla costante di velocità. Effetto isotopico. Effetto sale. Effetto sostituente. Relazioni lineari di energia libera. Temperatura isocinetica. Catalisi omogenea. Catalisi acido-base. Catalisi eterogenea: reazioni alle superfici uni e bimolecolari.

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta

**Testi di riferimento :**

F. Wilkinson, "Chemical Kinetics and Reaction Mechanism", Van Nostrand Reinhold.

K.S. Laidler, "Chemical Kinetics", Mc Graw Hill.

---

## ELETTROCHIMICA

(Titolare: Prof. FLAVIO MARAN)

**Periodo:** 2 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 50A+20E 0,00 CFU

**Obiettivi formativi :**

Lo scopo del corso è di consentire allo studente non solo di comprendere i fondamenti dell'elettrochimica ma anche di sviluppare la capacità d'analisi, sia teorica che pratica, dei processi elettrodici e di aspetti chimico-fisici ad essi connessi. Una parte del corso analizza le proprietà di equilibrio e di trasporto di fasi ed interfasi componenti i sistemi elettrochimici, con particolare attenzione a ciò che avviene all'interfaccia elettrodo-soluzione. Una seconda parte riguarda la cinetica elettrodica e

quindi l'analisi dei vari stadi che compongono i processi elettrochimici. L'analisi è condotta sfruttando i metodi elettrochimici più diffusi o quelli di recente sviluppo. Particolare attenzione è rivolta allo studio dei trasferimenti elettronici eterogenei ed omogenei, relative teorie, nonché alla loro applicazione in sistemi reali.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Sistemi elettrochimici: fasi ed interfasi. Soluzioni elettrolitiche. Interazione ionesovente e ione-ione. Convenzione, migrazione e diffusione. Conduttività. Cenni sulle proprietà di conduzione dei solidi. Livello di Fermi. Doppio strato elettrico: proprietà e struttura. Modello di Helmholtz e teoria di Gouy-Chapman-Stern. Differenza di potenziale interfasele. Tipi di elettrodo. Cinetica dei processi elettrochimici: schema generale e concetto di stadio lento. Sovratensione di attivazione. Teoria di Butler-Volmer del trasferimento di carica all'interfaccia elettrodo-soluzione. Coefficiente di trasferimento elettronico, costante eterogenea standard e corrente di scambio. Equazione di Tafel. Sovratensione di diffusione. Leggi di Fick. Cenni sulla risoluzione di problemi di diffusione. Equazione di Cottrell. Voltammetria all'elettrodo a disco rotante. Competizione tra velocità di diffusione e d'attivazione di barriera. Trasferimenti elettronici reversibili ed irreversibili. Cenni di cronopotenziometria e polarografia. Voltammetria ciclica. Reazioni chimiche accoppiate al trasferimento elettronico. Catalisi redox omogenea. Ultramicroelettrodi e ultramicrosonde. Teoria di Marcus del trasferimento elettronico. Analisi dei trasferimenti elettronici attraverso ponti molecolari ed in sistemi di rilevanza biologica.

Laboratorio: Esperimenti atti a permettere agli studenti di approfondire dal punto di vista pratico alcuni dei temi suddetti nonché a conoscere alcune tra le più importanti metodologie elettrochimiche. Esempi tipici sono: studio voltammetrico e caratterizzazione di processi elettrochimici reversibili ed irreversibili; elettrolisi ed uso di metodi stazionari; elettrocatalisi omogenea; simulazione digitale.

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta

**Testi di riferimento :**

A. J. Bard e L. R. Faulkner, "Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications", Wiley, 2a edizione, Wiley, 2001.

---

## INGLESE SCIENTIFICO

(Titolare: Dott.ssa ANGELA CROMPTON)

**Periodo:** 2 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 50A+20E 0,00 CFU

---

## LABORATORIO DI CHIMICA ANALITICA 2

(Titolare: Dott.ssa GABRIELLA FAVARO)

**Periodo:** III anno, 1 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 90A 0,00 CFU

**Prerequisiti :**

è ritenuto di estrema importanza didattica l'aver sostenuto gli esami di Chimica Generale e di Chimica Analitica.

**Obiettivi formativi :**

il Laboratorio di Chimica Analitica II si propone l'acquisizione da parte dello studente della manualità connessa all'utilizzo delle principali tecniche strumentali di laboratorio per mezzo di determinazioni analitiche di interesse teorico, ambientale ed industriale. Inoltre vuole fornire una conoscenza di base dei principali metodi statistici per il trattamento dei dati analitici. Il corso prevede 90 ore di lezione, di cui 30 di aula e 60 di laboratorio.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Trattamento statistico dei dati analitici: a) definizioni di base; b) accuratezza e precisione; c) distribuzione dell'errore e limite di rivelabilità; d) test statistici; e) regressione con il metodo dei minimi quadrati (e cenni del SIMPLEX); f) interferenze ed effetto matrice; f) metodi della retta di taratura (calibrazione esterna), dello standard interno e delle aggiunte tarate (calibrazione interna).

Le esperienze di laboratorio riguardano le seguenti tecniche:

gas-cromatografia, HPLC, cromatografia ionica, spettrofotometria UV-VIS, spettroscopia di assorbimento atomico.

**Struttura della verifica di profitto :**

Orale

**Descrizione verifica profitto :**

l'accertamento finale consiste in un esame orale che sarà svolto congiuntamente al corso di Chimica Analitica II, dopo presentazione di brevi relazioni

sulle esperienze di laboratorio.

**Testi di riferimento :**

D.A. Skoog, J.J. Leary, "Chimica Analitica Strumentale", EDISES, Napoli, 1995.

R.L. Anderson, "Practical Statistics for Analytical Chemists", VNR, NY, 1987

Appunti di lezione.

## LABORATORIO DI CHIMICA FISICA 2

(Titolare: Prof.ssa CAMILLA FERRANTE)

**Periodo:** III anno, 2 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:**

**Tipologie didattiche:** 90A 0,00 CFU

**Propedeuticità' :**

Chimica Fisica I

**Contenuto dell'attività formativa :**

Le esercitazioni consisteranno di esperimenti spettroscopici atti ad esemplificare quanto trattato nel corso teorico, in particolare di spettroscopia vibrorotazionale,

elettronica di assorbimento e di fluorescenza e di risonanza nucleare ed elettronica.

Spettroscopia Infrarossa di gas (HCl, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>) e interpretazione del loro comportamento

vibrorotazionale. Spettroscopia Infrarossa e Raman di sali inorganici e previsione del loro comportamento vibrazionale sulla base della teoria dei gruppi. Misura NMR dei tempi di rilassamento della magnetizzazione nucleare di un composto quale il glicerolo in funzione della temperatura e della presenza di una sostanza

paramagnetica. Spettro EPR della sostanza paramagnetica usata per l'esperimento NMR. Spettro EPR di radicali di sostanze aromatiche e loro interpretazione sulla base di calcoli di densità elettronica. Misure di assorbimento ed emissione (fluorescenza e fosforescenza) di composti aromatici e interpretazione degli spettri registrati sulla base del principio di Franck e Condon. Misura del tempo di rilassamento della fosforescenza di una molecola aromatica alla temperatura dell'azoto liquido.

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta, Orale

**Descrizione verifica profitto :**

l'esame è comune al corso di Chimica Fisica II e si baserà sulla

valutazione delle relazioni prodotte durante il Laboratorio, su alcune domande presenti nella prova scritta e su una interrogazione orale.

**Testi di riferimento :**

P.W. Atkins, Physical Chemistry, Sixth edition, Oxford University Press, 1998.

P.W. Atkins and R.S. Friedman, Molecular Quantum Mechanics, Third Edition, Oxford University Press, 1997.

## LABORATORIO DI CHIMICA FISICA 3

(Titolare: Prof. ANTONIO TOFFOLETTI)

**Periodo:** IV anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:**

**Tipologie didattiche:** 90A 0,00 CFU

**Prerequisiti :**

Conoscenza dei contenuti dei corsi di Fisica generale I e II.

**Obiettivi formativi :**

fornire agli studenti l'opportunità di misurare sperimentalmente alcune grandezze di interesse chimico fisico in particolare nei settori della termodinamica, della cinetica chimica e dell'elettrochimica. Il corso è collegato a quello di Chimica Fisica III, del quale rappresenta un opportuno complemento.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Il corso propone agli studenti l'esecuzione di alcuni esperimenti riguardanti la termodinamica chimica, la cinetica chimica e l'elettrochimica e la successiva elaborazione dei dati sperimentali con l'applicazione della teoria degli errori.

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta, Orale

**Descrizione verifica profitto :**

l'esame è congiunto con quello del corso d'aula di Chimica Fisica

III; dopo la conclusione delle prove di laboratorio e la stesura delle relativi elaborati scritti, lo studente dovrà sostenere la prova orale sui contenuti del corso d'aula con gli opportuni riferimenti all'attività di laboratorio.

**Testi di riferimento :**

P.W. Atkins, "Physical Chemistry", Oxford University Press.

S. Glasstone, "Introduction to Electrochemistry".

D.A. MacInnes, "The Principles of Electrochemistry".

K.A. Connors, "Chemical Kinetics".

**Ausili didattici :**

Appunti di lezione.

## LABORATORIO DI CHIMICA FISICA 4

(Titolare: Prof. ALESSANDRO GAMBARO)

**Periodo:** V anno, 1 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 90A 0,00 CFU

## LABORATORIO DI CHIMICA INORGANICA 1

(Titolare: Prof. MARCO ZECCA)

**Periodo:** III anno, 2 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 90A 0,00 CFU

### Obiettivi formativi :

verifica sperimentale di alcuni aspetti della chimica degli elementi illustrata nel corso d'aula e introduzione all'uso di tecniche spettroscopiche nella caratterizzazione di composti inorganici.

### Contenuto dell'attività formativa :

Integrazione teorica: elementi di teoria del legame nei composti di coordinazione (legame di valenza, teoria del campo cristallino, orbitale molecolare); interpretazione delle proprietà geometriche, termodinamiche, magnetiche e degli spettri elettronici dei composti di coordinazione in termini della teoria del campo cristallino. Le serie spettrochimica e nefeloauxetica dei leganti. Introduzione al laboratorio di Chimica Inorganica: nozioni di sicurezza in laboratorio; compilazione del quaderno di laboratorio; descrizione delle operazioni principali di laboratorio e delle esperienze; applicazione delle spettroscopie UV-Vis e IR ai composti inorganici, con particolare riguardo a quelli di coordinazione.

### Esercitazioni

- 1) Complessi di Werner: sintesi di acquopentaamminocobalto(III) tricloruro, pentaamminonitro-N)cobalto(III) dicloruro e pentaamminonitro-O)cobalto(III) dicloruro; verifica della serie spettrochimica.
- 2) Sintesi di tris-(2,4-pentandionato)cromo(III) e di tris-(3-nitro-2,4-pentandionato)cromo(III).
- 3) Sintesi di bis(ciclopentadienil)ferro(II) ("ferrocene").
- 4) Studio della cinetica di isomerizzazione di trans-potassio[diacquodiossalatocromato(III)] in cis-potassio[diacquodiossalatocromato(III)].
- 5) Sintesi di stagno diioduro, stagno tetraioduro e bis(trifenilfosfinossido-O)tetraiodostagno(IV).

### Struttura della verifica di profitto :

Scritta

### Testi di riferimento :

A. G. Sharpe, *Inorganic Chemistry*, 3rd edition, Longman o altri testi suggeriti per il corso di Chimica Inorganica I (vedi).

## LABORATORIO DI CHIMICA INORGANICA 2

(Titolare: Prof. GIANNI CAVINATO)

**Periodo:** IV anno, 2 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 90A 0,00 CFU

### Propedeuticità :

Corsi dei primi tre anni.

### Obiettivi formativi :

Introduzione alla sintesi di composti precursori e materiali inorganici con proprietà elettriche ed ottiche mirate.

### Contenuto dell'attività formativa :

Il corso tratta della sintesi di composti precursori e materiali inorganici con particolari proprietà elettriche ed ottiche sia in forma massiva che in film sottile. Lo studente verrà introdotto all'uso delle usuali tecniche di sintesi quali la precipitazione o la tecnica di "Schlenk" o ad altre tecniche non convenzionali quali la deposizione chimica da fase vapore (CVD e MOCVD) o alla tecnica "sol-gel". Al corso d'aula sono abbinate esperienze di laboratorio relative alla preparazione di materiali in film sottile, e sottoforma di nano-particelle, alla sintesi metallorganica in atmosfera inerte, alla modifica delle proprietà elettriche mediante drogaggio. Particolare enfasi viene data alla caratterizzazione dei prodotti ottenuti mediante le convenzioni tecniche di indagine spettroscopica e mediante tecniche di indagine superficiale.

### Struttura della verifica di profitto :

Orale

### Descrizione verifica profitto :

esame orale e discussione delle relazioni di laboratorio.

### Testi di riferimento :

## LABORATORIO DI CHIMICA INORGANICA 3

(Titolare: Prof. VITO DI NOTO)

**Periodo:** V anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:**

**Tipologie didattiche:** 90A 0,00 CFU

### **Prerequisiti :**

é opportuno aver superato gli esami dei corsi di *Chimica Inorganica I e II* e *Chimica Fisica I e II* con relativi laboratori.

### **Obiettivi formativi :**

Il corso si prefigge di introdurre lo studente alla pratica e alle metodiche della sintesi inorganica in atmosfere controllate di azoto ed argon, sotto vuoto e ad alta temperatura.

### **Contenuto dell'attività formativa :**

Durante le lezioni d'aula, che sono rappresentative del suddetto obiettivo, vengono illustrate le esperienze di laboratorio in termini di metodiche, reattività inorganica, teoria e trattamento dei dati.

*Esercitazioni di Laboratorio*

- *Catalisi eterogenea tipo Ziegler-Natta della terza generazione: preparazione di un catalizzatore supportato su  $-MgCl_2$ .*
- *Polimeri siliconici: preparazione e caratterizzazione di una gomma siliconica con particolari proprietà elastiche.*
- *Elettroliti polimerici ibridi inorganico-organici: sintesi, caratterizzazione, e conducibilità ionica di un materiale ibrido del tipo Z-IOPE a base di Fe, Pd e PEG600 preparato attraverso transizioni sol => gel e gel => plastico.*
- *Zeoliti: sintesi, caratterizzazione e studio delle proprietà di una zeolite di tipo X.*
- *Catalisi eterogenea applicata a problematiche ambientali: ossidazione di anidride solforosa ad anidride solforica catalizzata da fibre e tessuti di carbonio e da particolari carboni attivi. Sintesi, caratterizzazione dei catalizzatori e studio della cinetica del processo di trasformazione  $SO_2 \Rightarrow SO_3$ .*

### **Struttura della verifica di profitto :**

Scritta

### **Testi di riferimento :**

dispense ed appunti di lezione.

## LABORATORIO DI CHIMICA ORGANICA 2

(Titolare: Prof.ssa MARINA GOBBO)

**Periodo:** III anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:**

**Tipologie didattiche:** 90A 0,00 CFU

### **Contenuto dell'attività formativa :**

Il corso, parte integrante del parallelo corso di *Chimica Organica II*, impegna lo studente per due pomeriggi la settimana in esperienze di sintesi e caratterizzazione di composti organici. L'intento è quello di fornire esperienza diretta di argomenti trattati nel corrispondente corso teorico. Lo studente impara a familiarizzare con le comuni procedure di sintesi organica e ad acquisire dimestichezza con alcune tecniche analitiche e spettroscopiche (TLC, NMR, IR) indispensabili per seguire il decorso di una reazione o per identificare e caratterizzare reagenti e prodotti. In particolare, vengono effettuate le seguenti trasformazioni chimiche:

1. Sintesi di Grignard.
2. Esterificazione di Fischer di un acido carbossilico.
3. Sintesi dell'acido acetilsalicilico.
4. Trasposizione pinacolica.
5. Sintesi acetacetica.
6. Ossidazione del calcene.
7. Risoluzione di un miscuglio racemico.
8. Preparazione di osazoni di carboidrati.
9. Addizione di Diels-Alder.
10. Sintesi di una idantoina.

### **Struttura della verifica di profitto :**

Scritta

### **Testi di riferimento :**

- G. L. Pavia, G. M. Lampman, G. S. Ariz "Il Laboratorio di Chimica Organica", Ed. Sorbona 1994.  
A. Vogel "Chimica Organica Pratica", Ed. Ambrosiana, 1988.  
R. M. Roberts, J. C. Gilbert, S. F. Martin "Chimica Organica Sperimentale", Ed. Zanichelli 1999.



## LABORATORIO DI CHIMICA ORGANICA 3

(Titolare: Prof. FERNANDO FILIRA)

**Periodo:** IV anno, 1 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 90A 0,00 CFU

### Prerequisiti :

Frequenza ai laboratori di Chimica Organica I e Chimica Organica II

### Obiettivi formativi :

il corso si prefigge di stimolare nello studente l'interesse per le problematiche connesse con il lavoro di sintesi e di fornire strumenti e metodologie per risolverle. Le esperienze proposte intendono concretizzare e approfondire alcuni degli argomenti trattati nel corso di Organica III.

### Contenuto dell'attività formativa :

Nel corso del laboratorio lo studente imparerà a familiarizzare con la preparazione di molecole organiche utilizzando strategie di sintesi a più stadi. Per ognuna delle esperienze saranno valutate criticamente le metodiche proposte in letteratura, nonché i problemi connessi con costo e pericolosità dei reagenti usati.

Lo studente acquisirà una certa autonomia di lavoro e imparerà ad usare con dimestichezza le più comuni tecniche di purificazione e di analisi applicandole opportunamente ai composti sintetizzati.

### Struttura della verifica di profitto :

Scritta

### Descrizione verifica profitto :

La valutazione del laboratorio e dei relativi elaborati scritti contribuirà alla determinazione del voto dell'esame di Chimica Organica III.

### Testi di riferimento :

G. L. Pavia, G. M. Lampman, G. S. Ariz: "Il Laboratorio di Chimica Organica", Ed. Sorbona 1994.

A. Vogel: "Chimica Organica Pratica", Ed. Ambrosiana, 1988.

R. M. Roberts, J. C. Gilbert, S. F. Martin: "Chimica Organica Sperimentale", Ed. Zanichelli 1999.

## LABORATORIO DI CHIMICA ORGANICA 4

(Titolare: Prof. FABRIZIO MANCINI)

**Periodo:** V anno, 1 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 90A 0,00 CFU

### Propedeuticità :

Chimica Organica III e Laboratorio di Chimica Organica III

### Obiettivi formativi :

Al termine del corso la/lo studentessa/studente dovrà essere in grado di:

(a) condurre una ricerca bibliografica su banche dati on-line (STN, X-Fire, Current Contents, EBSCO, Science-Direct);

(b) utilizzare le tecniche di sintesi organica su piccola scala e quelle di manipolazione in atmosfera inerte;

(c) utilizzare autonomamente gli strumenti analitici più importanti per seguire il decorso di una reazione, purificare e caratterizzare i prodotti (GC-MS, HPLC, IR, UVVis, <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C NMR), effettuare uno studio cinetico.

### Contenuto dell'attività formativa :

Gli obiettivi sopraelencati saranno raggiunti mediante l'esecuzione di una serie di esperimenti impiegando tecniche non utilizzate nei precedenti corsi di laboratorio:

- funzionalizzazione di fullereni;

- sintesi di un polimero semiconduttore;

- reazioni di arilazione catalizzate da Pd;

- esecuzione di misure cinetiche.

### Struttura della verifica di profitto :

Pratica

### Descrizione verifica profitto :

l'esame è congiunto con quello del corso di Chimica Organica IV.

Verrà valutata l'attività svolta in laboratorio nel rispetto delle norme di sicurezza e la capacità di organizzare e mantenere in modo corretto il quaderno di laboratorio.

## MECCANISMI DI REAZIONI ORGANICHE (MOD. A)

(Titolare: Prof.ssa CRISTINA PARADISI)

**Periodo:** 2 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Commissione di profitto:****Tipologie didattiche:** 17A+6E 0,00 CFU**Contenuto dell'attività formativa :**

Chimica Ionica in Fase Gassosa

Settori interessati. Metodi sperimentali di determinazione di costanti di velocità e di costanti di equilibrio in reazioni ione-molecola. Proprietà termodinamiche (basicità, acidità, affinità elettronica) e reattività intrinseca (in assenza di solvatazione) di molecole organiche. Ionizzazione e dissociazione di molecole organiche mediante scarica corona in aria a pressione atmosferica: applicazioni per il trattamento di inquinanti volatili.

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta, Orale

**Descrizione verifica profitto :**

Accertamento scritto/orale

**Testi di riferimento :**

Il corso offre brevi monografie su alcuni settori avanzati della chimica organica in cui svolgono attività di ricerca alcuni docenti e ricercatori del Dipartimento di Chimica Organica.

---

**MECCANISMI DI REAZIONI ORGANICHE (MOD. B)**

(Titolare: Prof. GIANFRANCO SCORRANO)

**Periodo:** 2 semestre**Indirizzo formativo:** Corsi comuni**Commissione di profitto:****Tipologie didattiche:** 17A+6E 0,00 CFU**Obiettivi formativi :**

Il corso offre brevi monografie su alcuni settori avanzati della chimica organica in cui svolgono attività di ricerca alcuni docenti e ricercatori del Dipartimento di Chimica Organica.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Protonazione e solvatazione preferenziale

Descrizione dei metodi per la determinazione della basicità di composti organici ed interpretazione dei parametri di protonazione. Utilizzo dei parametri di solvatazione per l'interpretazione delle reazioni acido catalizzate. Determinazione mediante tecniche NMR del sito di protonazione di sistemi polibasici. Determinazione della solvatazione preferenziale in solventi misti.

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta, Orale

**Descrizione verifica profitto :**

Accertamento scritto/orale

---

**MECCANISMI DI REAZIONI ORGANICHE (MOD. C)**

(Titolare: Prof. PAOLO SCRIMIN)

**Periodo:** 2 semestre**Indirizzo formativo:** Corsi comuni**Commissione di profitto:****Tipologie didattiche:** 17A+6E 0,00 CFU**Obiettivi formativi :**

Il corso offre brevi monografie su alcuni settori avanzati della chimica organica in cui svolgono attività di ricerca alcuni docenti e ricercatori del Dipartimento di Chimica Organica.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Reazioni ioniche in fase condensata: reazioni di idrolisi e catalisi metallica

Meccanismi di idrolisi di esteri carbossilici e fosforici. Catalisi acida e catalisi metallica. Sistemi enzimatici: proteasi, fosfatasi, nucleasi. Modelli sintetici. Enzimi artificiali.

**Struttura della verifica di profitto :**

Orale

**Descrizione verifica profitto :**

Accertamento: discussione di un lavoro originale della letteratura.

---

**METODI FISICI IN CHIMICA INORGANICA (MOD. A)**

(Titolare: Prof. MAURIZIO CASARIN)

**Periodo:** 2 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 25A+10E 0,00 CFU

**Obiettivi formativi :**

il corso è suddiviso in due moduli di ~40 (modulo A) e ~20 (modulo B) ore ciascuno. Nel primo modulo sono affrontati in modo dettagliato i principi del metodo Hartree-Fock e della teoria del funzionale densità; nel secondo sono descritte le tecniche di simulazione e di ottimizzazione di sistemi chimici.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Equazione di Schrödinger per atomi polielettronici;  
Proprietà nodali delle funzioni d'onda angolari e radiali;  
Orbitali di Slater, gaussiani e numerici;  
Prodotto di Hartree;  
Determinante di Slater;  
Concetto di interazione di configurazione;  
Elementi di matrice di operatori mono- e bi-elettronici, regole di Slater per il loro calcolo; Integrali Coulombiani e di scambio;  
Seconda quantizzazione, operatori di creazione e di annichilazione;  
Rappresentazione di operatori mono- e bi-elettronici nell'ambito della seconda quantizzazione;  
Equazioni di Hartree-Fock;  
Teorema di Koopmans;  
Equazioni di Roothaan;  
Analisi della popolazione: schema di Mulliken e di Hirschfeld;  
Funzioni di base e notazione di Pople per le funzioni di base;  
Definizione di funzionale e di derivata funzionale;  
Teoria del funzionale densità;  
Teoremi di Hohenberg e Kohn;  
Metodo di Kohn e Sham.

**Struttura della verifica di profitto :**

Orale

**Descrizione verifica profitto :**

esame orale

**Testi di riferimento :**

A. Szabo and N. S. Ostlund, *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*, MacMillan Publishing Co., Inc., 1982;  
R. G. Parr and W. Yang *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*, Oxford University Press, 1989;  
M. P. Allen, D. J. Tildesley, *Molecular simulation of liquids*, Oxford University Press, 1987

**Ausili didattici :**

Letteratura Specializzata.

## **METODI FISICI IN CHIMICA INORGANICA (MOD. B)**

(Titolare: Dott. ANDREA VITTADINI)

**Periodo:** 2 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 25A+10E 0,00 CFU

**Obiettivi formativi :**

il corso è suddiviso in due moduli di ~40 (modulo A) e ~20 (modulo B) ore ciascuno. Nel primo modulo sono affrontati in modo dettagliato i principi del metodo Hartree-Fock e della teoria del funzionale densità; nel secondo sono descritte le tecniche di simulazione e di ottimizzazione di sistemi chimici.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Richiami di Meccanica statistica: insiemi statistici e calcolo di funzioni termodinamiche;  
Metodo Monte Carlo:  
Algoritmo di Metropolis;  
Simulazioni MC nell'insieme canonico e isoterma-isobaro;  
Modello di Ising per lo studio di sistemi magnetici ed interfacce solido-gas;  
La Dinamica molecolare:  
Algoritmi di integrazione;  
Oscillatore armonico;  
Vincoli con il metodo dei moltiplicatori indeterminati;  
Struttura di un programma MD;  
Il calcolo di proprietà di equilibrio da simulazioni:  
Proprietà statiche, dinamiche, funzioni di correlazione nello spazio diretto e reciproco;

Funzioni di correlazione temporali

Tecniche di ottimizzazione:

Ricerca di minimi e punti di sella;

Mappe energetiche, algoritmi del Simplex, Steepest descent, Conjugate gradient,

Newton-Raphson, GDII, dinamiche smorzate, annealing simulato;

Simulazioni basate su principi primi: basi di onde piane, pseudopotenziali, calcolo dell'energia totale;

Algoritmo Car-Parrinello.

**Struttura della verifica di profitto :**

Orale

**Descrizione verifica profitto :**

esame orale

**Testi di riferimento :**

A. Szabo and N. S. Ostlund, *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*, MacMillan Publishing Co., Inc., 1982;

R. G. Parr and W. Yang *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*, Oxford University Press, 1989;

M. P. Allen, D. J. Tildesley, *Molecular simulation of liquids*, Oxford University Press, 1987

**Ausili didattici :**

Letteratura Specializzata.

## METODI FISICI IN CHIMICA ORGANICA

(Titolare: Prof.ssa CRISTINA PARADISI)

**Periodo:** 1 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 50A+20E 0,00 CFU

**Obiettivi formativi :**

fornire agli studenti le informazioni e competenze necessarie per

l'identificazione di molecole organiche ragionevolmente complesse attraverso analisi spettroscopiche NMR, IR e di massa. Offrire una panoramica delle attuali potenzialità strumentali e cenni sulle procedure analitiche più avanzate.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Risonanza Magnetica Nucleare. Proprietà magnetiche dei nuclei. Principi operativi e strumentazione. Tecnica ad impulsi con trasformata di Fourier. Parametri di acquisizione. Rilassamento. Spostamento chimico. Accoppiamento scalare.

Equivalenza chimica ed equivalenza magnetica. Spettri del primo ordine e di ordine superiore. Diasterotopismo. NMR dinamico.

Doppia risonanza. Reagenti di shift. Determinazione di eccesso enantiomerico. Spettroscopia <sup>13</sup>C-NMR. Effetto Nucleare Overhauser.

Cenni su tecniche di spettroscopia NMR di correlazione.

Spettrometria di massa. Principi operativi e strumentazione. Sorgenti per ionizzazione EI e CI. Analizzatori di ioni (settore magnetico, quadrupolo, trappola ionica ('ion trap'), analizzatore a tempo di volo). Rivelatori. Sensibilità, intervallo di massa e

risoluzione. Focalizzatori di energia (settore elettrostatico). Ionizzazione per urto elettronico e frammentazione: distribuzione dell'energia interna e velocità di reazione. Picchi isotopici. Ioni metastabili. Frammentazione caratteristiche dei gruppi funzionali in composti organici.

Ionizzazione chimica. Analisi di molecole

ad alto peso molecolare e/o termolabili e nuovi metodi di ionizzazione: FAB, FIB,

MALDI, electrospray. Accoppiamenti GC/MS ed HPLC/MS.

Spettroscopia infrarossa. Principi, definizioni e strumentazione. Rassegna delle principali bande caratteristiche dei gruppi funzionali di composti organici.

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta

**Testi di riferimento :**

R. M. Silverstein, F. X. Webster, "Identificazione Spettroscopica di Composti Organici", Casa Editrice Ambrosiana, 1999.

J. R. Chapman, "Practical Organic Mass Spectrometry", Wiley, 1995.

H. Friebolin, Basic "One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy", VCH, 1991.

H. Günther, "NMR Spectroscopy", 2nd ed., John Wiley & Sons, 1994.

## MINERALOGIA

(Titolare: Prof.ssa GABRIELLA SALVIULO)

**Periodo:** 1 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 50A+20E 0,00 CFU

**Obiettivi formativi :**

il corso prevede l'insegnamento dello studio dello stato solido dei cristalli dal punto di vista cristallografico-morfologico-strutturistico, chimico e fisico. La trattazione degli argomenti prevede anche lo svolgimento di un congruo numero di

esercitazioni pratiche che permetterà allo studente di acquisire familiarità con i metodi diagnostici e di ricerca studiati.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Lo stato solido cristallino. Cristallografia morfologica. Legge della costanza dell'angolo diedro, legge di Hauy. Le 32 classi di simmetria. Distribuzione omogenea periodica. I 14 reticoli bravesiani e loro simmetria. I 230 gruppi spaziali. Proprietà fisiche scalari e vettoriali dei cristalli. Principio di Neuman. Le proprietà e diffrazione dei raggi X. Equazione di Bragg. Il reticolo reciproco. Metodo del cristallo rotante, delle polveri. Intensità degli effetti di diffrazione. Analisi chimiche mediante spettrometria dei raggi X: fluorescenza e microsonda elettronica. SEM, TEM. Cristallografia: cenni. Isomorfismo e polimorfismo. Ottica cristallografica: proprietà della luce. Birifrazione e birifrangenza. Indicatrici ottiche. Il microscopio da mineralogia. Pleocroismo, estinzione, colori d'interferenza. Determinazione del segno ottico. Misura dell'indice di rifrazione. Mineralogia speciale. Silicati, elementi nativi, solfuri, ossidi, solfati carbonati, fosfati, solfuri.

**Struttura della verifica di profitto :**

Orale

**Descrizione verifica profitto :**

unica prova orale.

**Testi di riferimento :**

Mazzi Bernardini -Fondamenti di cristallografia e ottica cristallografica- ed USES

Deer, Howie Zussman -Rock forming minerals- Longman

**Ausili didattici :**

FD Bloss An introduction to the methods of optical crystallography.

Ed Holt, Rinhard and Winston.

---

## SINTESI E TECNICHE SPECIALI INORGANICHE

(Titolare: Prof. FRANCO MORANDINI)

**Periodo:** 2 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 50A+20E 0,00 CFU

**Propedeuticità :**

i corsi di Chimica Generale ed Inorganica e di Chimica Organica.

**Obiettivi formativi :**

il corso si propone di approfondire la preparazione dello studente nella chimica dei composti metallorganici dei metalli di transizione.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Introduzione alla chimica dei complessi metallorganici dei metalli di transizione. Complessi olefinici ed allilici. Complessi ciclopentadienilici e carbociclici. Complessi contenenti legami s metallo-carbonio. Reazioni di addizione ossidativa ed eliminazione riduttiva. Reazioni di inserzione e di espulsione. Cenni sulla stereochimica di complessi metallorganici. Impiego di complessi organometallici in catalisi omogenea ed uso di complessi metallorganici otticamente attivi in catalisi omogenea asimmetrica. Idrogenazione asimmetrica di substrati prochirali. Processo Monsanto per la produzione della L-DOPA. Il corso prevede inoltre una parte pratica di riconoscimento e caratterizzazione di composti metallorganici di metalli di transizione attraverso spettroscopia NMR multinucleare.

**Struttura della verifica di profitto :**

Orale

**Descrizione verifica profitto :**

esame orale.

**Testi di riferimento :**

Testo adottato: Appunti di lezione

Testi consigliati

F.A.Cotton, G.Wilkinson, "Chimica Inorganica" Ambrosiana, Milano.

J.P.Collman, L.S.Hegedus, J.R.Norton,R.G.Finke, "Principles and Applications of Organotransition Metal Chemistry" University Science Books, California.

R.H.Crabtree, "The Organometallic Chemistry of the Transition Metals" John Wiley & Sons, New York

Ch.Elschenbroich, A.Salzer Organometallics A Concise Introduction. VCH Weinheim.

---

## SINTESI E TECNICHE SPECIALI ORGANICHE (MOD. B)

(Titolare: da definire)

**Periodo:** 1 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 25A+10E 0,00 CFU

**Obiettivi formativi :**

Il corso si propone di rendere lo studente familiare con metodologie e strategie di sintesi di composti organici

**Contenuto dell'attività formativa :**

Metodologie sintetiche non convenzionali.

Sintesi in trasferimento di fase

Sintesi enzimatiche

Sintesi combinatoria

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta

**Testi di riferimento :**

F. A. Carey, R. J. Sundberg, *Advanced Organic Chemistry. Part B: Reactions and Synthesis. Third Edition*, Plenum Press, 1990.

S. Warren, *Designing Organic Syntheses. A Programmed Introduction to the Synthron Approach* Wiley, 1983.

E. J. Corey, X.-M. Cheng *The Logic of Chemical Synthesis* Wiley, 1995.

G. Jung *Combinatorial Chemistry. Synthesis, Analysis, Screening* Wiley-VCH, 1999.

---

## SPETTROSCOPIA MOLECOLARE (MOD. A)

(Titolare: Prof. DANILO PEDRON)

**Periodo:** 1 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 25A+10E 0,00 CFU

**Prerequisiti :**

Fisica II (onde elettromagnetiche), Chimica Fisica I (Introduzione alla Quantomeccanica), Chimica Fisica II (Introduzione alle Spettroscopie).

**Obiettivi formativi :**

il corso vuole affrontare i temi moderni della spettroscopia ottica sia dal punto di vista teorico che delle tecniche sperimentali. Verranno considerati sia i responsi ottici lineari che non lineari mettendo in evidenza alcune spettroscopie di particolare interesse.

**Contenuto dell'attività formativa :**

Interazione tra radiazione elettromagnetica e materia. Funzioni dipendenti dal tempo per lo studio della risposta ottica. La funzione dielettrica. Spettroscopie di assorbimento ed emissione. Simmetrie e regole di selezione. Spettroscopie di scattering: Raman e Raman risonante. Spettroscopia ottica per lo studio della dinamica degli stati eccitati. Spettroscopie di Tunneling e di Electron Energy Loss.

**Struttura della verifica di profitto :**

Orale

**Testi di riferimento :**

J.L. McHale, *Molecular spectroscopy*, Prentice-Hall, 1999.

H. Kuzmany, *Solid state spectroscopy*, Springer-Verlag, 1998.

R. Boyd, *Nonlinear Optics*, Academic Press, 1992.

P.N. Butcher and D. Cotter, *The elements of nonlinear optics*, Cambridge University Press, 1990.

---

## SPETTROSCOPIA MOLECOLARE (MOD. B)

(Titolare: Prof. MORENO MENEGHETTI)

**Periodo:** 1 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 25A+10E 0,00 CFU

**Prerequisiti :**

Fisica II (onde elettromagnetiche), Chimica Fisica I (Introduzione alla Quantomeccanica), Chimica Fisica II (Introduzione alle Spettroscopie).

**Obiettivi formativi :**

il corso vuole affrontare i temi moderni della spettroscopia ottica sia dal punto di vista teorico che delle tecniche sperimentali. Verranno considerati sia i responsi ottici lineari che non lineari mettendo in evidenza alcune spettroscopie di particolare interesse.

**Contenuto dell'attività formativa :**

*La suscettività ottica non lineare. Propagazione di onde elettromagnetiche in mezzi non lineari. Teoria quantomeccanica della suscettività ottica non lineare.*

*Modello a due livelli della risposta ottica non lineare. Tecniche spettroscopiche per la caratterizzazione di proprietà ottiche non lineari. Processi dipendenti dall'indice di rifrazione non lineare. Effetto fotorifrattivo. Assorbimento a due fotoni.*

**Struttura della verifica di profitto :**

Orale

**Descrizione verifica profitto :**

una prova orale.

**Testi di riferimento :**

J.L. McHale, *Molecular spectroscopy*, Prentice-Hall, 1999.

H. Kuzmany, *Solid state spectroscopy*, Springer-Verlag, 1998.

R. Boyd, *Nonlinear Optics*, Accademic Press, 1992.

P.N. Butcher and D. Cotter, *The elements of nonlinear optics*, Cambridge University Press, 1990.

## **STORIA DELLA SCIENZA (MOD. A)**

(Titolare: da definire) - Mutuato da: Laurea Quinquennale in Scienze Biologiche

**Periodo:** 1 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 40A 0,00 CFU

**Obiettivi formativi :**

*Il corso è annuale e intende presentare le principali idee che hanno dato origine alla scienza contemporanea. Esso analizza i mutamenti scientifici e filosofici verificatisi nel periodo compreso tra la metà del Cinquecento e i primi decenni del Novecento. Il programma è sviluppato in circa 90 ore di lezione, ivi comprese 10/15 ore di seminari svolte sia dal docente del corso sia da docenti dell'Ateneo o di altri Atenei italiani e esteri. Il corso è diviso in due moduli di circa quaranta ore ciascuno (5 crediti ciascuno): il primo modulo comprende le prime due sezioni del programma; il secondo modulo la terza e la quarta sezione del programma.*

**Contenuto dell'attività formativa :**

*La prima sezione riguarda la rivoluzione scientifica e filosofica realizzatasi nel lungo periodo che inizia con le pubblicazioni dei trattati di Copernico e Vesalio, prosegue con le ricerche condotte da Keplero, Harvey, Cartesio e Galilei, e si chiude con la morte di Newton. L'analisi riguarda i seguenti temi:*

- principali scoperte che in quel periodo vengono effettuate nelle scienze astronomiche, biologiche, fisiche, chimiche e matematiche;
- carattere universale dell'interazione gravitazionale;
- riflessioni seicentesche relative al metodo della ricerca e al meccanicismo;
- tesi filosofiche sviluppate nel Seicento da scienziati a proposito dei rapporti tra realtà, sensazioni e teorie;
- nascita dell'idea di progresso scientifico.

*La seconda sezione è dedicata alla formazione di nuovi programmi di ricerca nel Settecento e nella prima metà dell'Ottocento, con particolare riferimento ai seguenti temi:- indagini teoriche e sperimentali che portano alla individuazione del carattere universale dell'interazione elettromagnetica e alla formulazione del concetto di campo;*

- nascita di concezioni evolucionistiche in astronomia e biologia;
- scoperta del principio di conservazione dell'energia;
- mutamenti nella concezione dello spazio.

*La terza sezione prende in esame le radici classiche della scienza contemporanea, così come si sono formate nella seconda metà dell'Ottocento, e si rivolge alle seguenti aree tematiche:*

- teorie di Darwin sull'evoluzione;
- sviluppi matematici del concetto di campo;
- calcolo delle probabilità e determinismo nella nuova termodinamica;
- le nuove radiazioni e la scoperta dell'elettrone;
- la scoperta del neurone e la nascita delle odierne neuroscienze.

*La quarta sezione del corso costituisce un'introduzione ai problemi tipici della scienza e della filosofia del Novecento:*

- elementi di relatività ristretta e primi modelli quantistici dell'atomo;
- trasformazione nei rapporti tra teoria ed esperienza;
- nuove forme del problema mente/corpo;
- elementi di teoria della conoscenza scientifica

**Struttura della verifica di profitto :**

Scritta

**Testi di riferimento :**

Testi di consultazione

Storia della Scienza Moderna e Contemporanea (diretta da Paolo Rossi), UTET, Torino, 1988.

E. Bellone, *Caos e armonia: storia della fisica moderna e contemporanea*, UTET,

Torino 1990 .

B. Continenza, Darwin, collana "I grandi della scienza", Le Scienze, 1998.

G. Peruzzi, Maxwell, collana "I grandi della scienza", Le Scienze, 1998.

G. Peruzzi, Bohr, collana "I grandi della scienza", Le Scienze, 2001.

M.L. Dalla Chiara e G. Toraldo di Francia, *Introduzione alla filosofia della scienza*, Bari, Laterza, 1999.

G. Peruzzi (a cura di), *Scienza e realtà. Riduzionismo e antiriduzionismo nelle scienze del Novecento*, Milano, Bruno Mondadori, 2000.

## STORIA DELLA SCIENZA (MOD. B)

(Titolare: da definire) - Mutuato da: Laurea Quinquennale in Scienze Biologiche

**Periodo:** 2 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 40A 0,00 CFU

### Obiettivi formativi :

Il corso è annuale e intende presentare le principali idee che hanno dato origine alla scienza contemporanea. Esso analizza i mutamenti scientifici e filosofici verificatisi nel periodo compreso tra la metà del Cinquecento e i primi decenni del Novecento. Il programma è sviluppato in circa 90 ore di lezione, ivi comprese 10/15 ore di seminari svolte sia dal docente del corso sia da docenti dell'Ateneo o di altri Atenei italiani e esteri. Il corso è diviso in due moduli di circa quaranta ore ciascuno (5 crediti ciascuno): il primo modulo comprende le prime due sezioni del programma; il secondo modulo la terza e la quarta sezione del programma.

### Contenuto dell'attività formativa :

La prima sezione riguarda la rivoluzione scientifica e filosofica realizzatasi nel lungo periodo che inizia con le pubblicazioni dei trattati di Copernico e Vesalio, prosegue con le ricerche condotte da Keplero, Harvey, Cartesio e Galilei, e si chiude con la morte di Newton. L'analisi riguarda i seguenti temi:

- principali scoperte che in quel periodo vengono effettuate nelle scienze astronomiche, biologiche, fisiche, chimiche e matematiche;
- carattere universale dell'interazione gravitazionale;
- riflessioni seicentesche relative al metodo della ricerca e al meccanicismo;
- tesi filosofiche sviluppate nel Seicento da scienziati a proposito dei rapporti tra realtà, sensazioni e teorie;
- nascita dell'idea di progresso scientifico.

La seconda sezione è dedicata alla formazione di nuovi programmi di ricerca nel Settecento e nella prima metà dell'Ottocento, con particolare riferimento ai seguenti temi: - indagini teoriche e sperimentali che portano alla individuazione del carattere universale dell'interazione elettromagnetica e alla formulazione del concetto di campo;

- nascita di concezioni evoluzionistiche in astronomia e biologia;
- scoperta del principio di conservazione dell'energia;
- mutamenti nella concezione dello spazio.

La terza sezione prende in esame le radici classiche della scienza contemporanea, così come si sono formate nella seconda metà dell'Ottocento, e si rivolge alle seguenti aree tematiche:

- teorie di Darwin sull'evoluzione;
- sviluppi matematici del concetto di campo;
- calcolo delle probabilità e determinismo nella nuova termodinamica;
- le nuove radiazioni e la scoperta dell'elettrone;
- la scoperta del neurone e la nascita delle odierne neuroscienze.

La quarta sezione del corso costituisce un'introduzione ai problemi tipici della scienza e della filosofia del Novecento:

- elementi di relatività ristretta e primi modelli quantistici dell'atomo;
- trasformazione nei rapporti tra teoria ed esperienza;
- nuove forme del problema mente/corpo;
- elementi di teoria della conoscenza scientifica.

### Struttura della verifica di profitto :

Scritta

### Testi di riferimento :

Storia della Scienza Moderna e Contemporanea (diretta da Paolo Rossi), UTET, Torino, 1988.

E. Bellone, *Caos e armonia: storia della fisica moderna e contemporanea*, UTET, Torino 1990 .

B. Continenza, Darwin, collana "I grandi della scienza", Le Scienze, 1998.

G. Peruzzi, Maxwell, collana "I grandi della scienza", Le Scienze, 1998.

G. Peruzzi, Bohr, collana "I grandi della scienza", Le Scienze, 2001.

M.L. Dalla Chiara e G. Toraldo di Francia, *Introduzione alla filosofia della scienza*, Bari, Laterza, 1999.

G. Peruzzi (a cura di), *Scienza e realtà. Riduzionismo e antiriduzionismo nelle scienze*



## STRUTTURISTICA CHIMICA

---

(Titolare: Prof. MARIO MAMMI)

**Periodo:** 2 semestre  
**Indirizzo formativo:** Corsi comuni  
**Commissione di profitto:**  
**Tipologie didattiche:** 50A+20E 0,00 CFU

### **Obiettivi formativi :**

È il corso per chimici nel quale sono trattati i principi della diffrazione dei raggi X e i relativi metodi teorico-sperimentali per l'analisi della struttura chimica a livello atomico attraverso il calcolo della densità elettronica. Poiché l'analisi roentgenografica è normalmente condotta su sostanze allo stato cristallino, vengono riportate anche alcune nozioni di base della cristallografia strutturale (geometria reticolare, simmetrie). Il corso fornisce i mezzi matematici necessari per descrivere i fenomeni fisici e per condurre l'analisi strutturale. Non sono quindi richieste specifiche propedeuticità e può essere seguito da studenti di Chimica anche del III anno (vecchio ordinamento). È correlabile al corso di "Chimica Fisica dello Stato Solido" e, per taluni aspetti, a quello di "Biochimica Fisica". Studenti di Fisica vi trovano complementarità con il corso di "Struttura della Materia" (per laurea in Fisica).

### **Contenuto dell'attività formativa :**

*Premessa matematica:* Numeri complessi, vettori, funzioni. Trasformate di Fourier e spazi reciproci. Operazioni di convoluzione.

*Diffrazione della radiazione elettromagnetica:* descrizione di un'onda elettromagnetica. Diffrazione della radiazione da parte di un elettrone. Geometria della diffrazione (sfera di Ewald e sfera limite). Spettro di diffrazione di atomi e molecole. Effetti della agitazione termica sulla diffrazione.

*Diffrazione da parte dei cristalli:* reticolo fisico e sua trasformata di Fourier.

*Condizioni di Laue e reticolo reciproco. Geometria reticolare e diffrazione (distanze interplanari, indici di Miller, legge di Bragg). Calcolo dei fattori di struttura e della densità elettronica.*

*Determinazione delle strutture cristalline: Problema della fase. Risoluzione strutturale (metodi di Patterson, dell'atomo pesante, della sostituzione isomorfa, metodi diretti). Affinamento della struttura (sintesi di Fourier differenza, minimi quadrati). Significatività dei risultati: grado di risoluzione, errori di determinazione di serie, errori statistici e sistematici, deviazioni standard.*

*Simmetrie: Operazioni e operatori di simmetria. Gruppi puntuali. Simmetrie traslazionali. Reticoli di Bravais. Gruppi spaziali. Effetti delle simmetrie sulla diffrazione (estinzioni). Tabelle internazionali di cristallografia.*

*Spettri di polveri cristalline e di fibre (cenni).*

### **Struttura della verifica di profitto :**

Scritta

### **Testi di riferimento :**

G. Carobbi, "Trattato di Mineralogia" Vol. I, USES 1971 (per la parte di cristallografia strutturale).

C. Giacovazzo, "Fundamentals of Crystallography", Oxford University Press, 1992.

### **Ausili didattici :**

Appunti e dispense di lezione.