

Corso di Laurea Triennale in CHIMICA

Il nostro attuale modello di vita è basato sulla chimica. Dai prodotti per l'igiene ai vestiti che indossiamo, ai mezzi di trasporto che usiamo, ai circuiti che fanno funzionare lettori CD e cellulari, alle medicine. Tutto questo funziona grazie alle ricerche e all'inventiva dei chimici, alla loro capacità di progettare nuovi materiali e nuovi metodi per produrli. Nessuna delle tecnologie che utilizzeremo potrà esistere senza lo studio e il lavoro dei chimici del futuro: cioè degli studenti che oggi decidono di diventare chimici e cominciano a entrare in laboratorio con la loro curiosità e la loro fantasia. Di più, la chimica può fornire le soluzioni più appropriate per i grandi problemi di domani: una produzione ecosostenibile, l'alimentazione di miliardi di persone, nuovi farmaci. Per ottenere questi fondamentali risultati bisogna conoscere la struttura intima della materia e le sue trasformazioni. Per questo nel corso di laurea in Chimica della Facoltà di Scienze di Tor Vergata è data così grande importanza sia alla formazione di base che alle attività di laboratorio, allo scopo di acquisire sia le conoscenze teoriche che le tecniche strumentali essenziali alla formazione di un chimico. Insieme alle prime esperienze pratiche, si studiano la matematica, la fisica e i fondamenti della chimica: si studiano le reazioni chimiche, i metodi per determinare la struttura delle molecole, per isolarle, analizzarle e utilizzarle in modo controllato. Un laureato in chimica è molto richiesto perché le sue competenze sono indispensabili in molti settori della ricerca e della produzione. Gli sbocchi professionali sono dunque numerosi: i chimici sono indispensabili per il controllo ambientale, sanitario e della sicurezza alimentare negli enti preposti e nelle strutture private. La produzione industriale alimentare, chimica, farmaceutica, cosmetica, elettronica, è basata sul lavoro dei chimici. Poi c'è la ricerca, all'università o negli enti di ricerca (CNR, ENEA, ISS). Non tutti sanno che l'area romana è la prima in Italia per numero di ricercatori e presenza di enti di ricerca nel territorio. È lo sbocco naturale per chi dopo la laurea triennale e magistrale prosegue con il dottorato di ricerca. In ogni caso, la formazione acquisita nel corso di laurea di Tor Vergata è un ottimo biglietto da visita, perché vuol dire aver studiato in uno dei centri di ricerca più prestigiosi d'Italia, il cui valore scientifico è riconosciuto a livello internazionale. E vuol dire aver avuto la possibilità di essere seguiti dai docenti molto da vicino, nelle aule e nei laboratori: il rapporto tra numero dei professori e studenti è infatti molto elevato, e permette un contatto continuo tra docente e studente. L'ampia possibilità di impiego di chi è laureato in chimica dipende anche dalle molte e diversificate competenze del chimico. Il chimico analitico studia metodi e procedure con cui si determinano il tipo e la quantità delle diverse sostanze presenti, ad esempio negli alimenti o nell'acqua di un fiume. Lavora in tutti i settori dell'industria, nella difesa dell'ambiente, nel controllo della sicurezza degli alimenti, e a volte entra anche nei tribunali. Il biochimico, invece, studia i processi chimici alla base della vita, dando un contributo fondamentale allo sviluppo di nuovi farmaci o alla comprensione dei meccanismi con cui le molecole biologiche esplicano la loro attività. Il chimico fisico studia le cause e i meccanismi dei fenomeni chimici, fornendo schemi e modelli interpretativi a tutta la chimica. È lui che sviluppa e controlla le scienze dell'infinitamente piccolo: le nanoscienze. Infine ci sono i chimici organici e i chimici inorganici, che si trovano in tutti i laboratori di ricerca e in tutte le industrie: sono loro che progettano e sintetizzano le nuove molecole e i nuovi materiali che saranno alla base di tutte le future tecnologie. Sono loro che lavorano per trovare metodi di sintesi ecocompatibili, che permettano una produzione chimica meno inquinante verso l'ambiente e meno costosa dal punto di vista energetico. L'obiettivo principale della Laurea Triennale è la formazione di base degli studenti e l'attività didattica è concentrata in pochi corposi esami per ogni ciclo didattico. L'accesso al corso di laurea senza obblighi formativi è legato al superamento di una prova di ingresso obbligatoria, costituita da domande elementari di matematica e di Chimica di base. Per tutto il corso di laurea, gli studenti potranno avvalersi di un tutor nominato all'inizio dell'anno

accademico. Come conclusione degli studi il corso di laurea triennale prevede una attività di tirocinio di 3 mesi che può essere svolta sia nei laboratori dell'Università, sia presso altri centri di ricerca pubblici o privati.

Ordinamento degli Studi - Laurea Triennale

A.A. 2014/2015

Per gli immatricolati nell'a.a. 2014/2015 il corso di studi sarà articolato secondo il seguente piano di studi:

I° Anno

I SEMESTRE

| | | |
|--|----------|--------|
| Chimica Generale (mod.1) | CHIM/03 | 10 CFU |
| Chimica Generale (mod.2) | CHIM/03 | 4 CFU |
| Analisi Matematica I | MAT/05 | 8 CFU |
| Prevenzione e sicurezza nei lab. chimici | CHIM/12 | 2 CFU |
| Inglese | L-LIN/12 | 4 CFU |

II SEMESTRE

| | | |
|---|---------|--------|
| Fisica Generale I | FIS/01 | 8 CFU |
| Chimica Organica I con elementi di lab. | CHIM/06 | 10 CFU |
| Chimica Inorganica I | CHIM/03 | 6 CFU |
| Fondamenti di Chimica Analitica | CHIM/01 | 6 CFU |
| Programmazione | INF/01 | 2 CFU |

2° Anno

I SEMESTRE

| | | |
|-----------------------|---------|--------|
| Analisi Matematica II | MAT/05 | 8 CFU |
| Chimica Analitica I | CHIM/01 | 6 CFU |
| Chimica Inorganica II | CHIM/03 | 6 CFU |
| Chimica Organica II | CHIM/06 | 10 CFU |

II SEMESTRE

| | | |
|---------------------------------|---------|-------|
| Fisica Generale II | FIS/01 | 8 CFU |
| Chimica Fisica I e lab. (mod.1) | CHIM/02 | 7 CFU |
| Chimica Fisica I e lab. (mod.2) | CHIM/02 | 3 CFU |
| Chimica Analitica II | CHIM/01 | 6 CFU |

3° Anno

I SEMESTRE

| | | |
|-----------------------|---------|--------|
| Chimica Fisica II | CHIM/02 | 10 CFU |
| Chimica Biologica | BIO/10 | 9 CFU |
| Chimica Analitica III | CHIM/01 | 8 CFU |

II SEMESTRE

| | | |
|----------------------|---------|-------|
| Chimica Organica III | CHIM/06 | 6 CFU |
|----------------------|---------|-------|

| | | |
|----------------------|---------|--------|
| Chimica Fisica III | CHIM/02 | 6 CFU |
| Laboratorio a scelta | | 6 CFU |
| Laboratorio a scelta | | 6 CFU |
| Prova Finale | | 15 CFU |

Per gli immatricolati negli a.a. precedenti il III anno sarà organizzato secondo il seguente calendario:

3° Anno

I SEMESTRE

| | | |
|-----------------------|---------|--------|
| Chimica Fisica II | CHIM/02 | 10 CFU |
| Chimica Biologica | BIO/10 | 9 CFU |
| Laboratorio a scelta* | | 6 CFU |

II SEMESTRE

| | | |
|-----------------------|---------|--------|
| Chimica Organica III | CHIM/06 | 6 CFU |
| Chimica Fisica III | CHIM/02 | 6 CFU |
| Programmazione | INF/01 | 2 CFU |
| Laboratorio a scelta* | | 6 CFU |
| Prova Finale | | 15 CFU |

Per accedere al corso di laurea è necessario essere in possesso di un diploma di scuola secondaria superiore di durata quinquennale o di altro titolo di studio conseguito all'estero, riconosciuto idoneo. Un test di ingresso obbligatorio permetterà di valutare gli eventuali obblighi formativi. Il test verrà effettuato una prima volta agli inizi di settembre e potrà essere ripetuto alla fine di settembre. In caso di non superamento, lo studente sarà obbligato a superare l'esame di Analisi Matematica I prima di poter sostenere esami del secondo anno. Sono richieste adeguate conoscenze dei principi generali delle materie scientifiche e dei seguenti argomenti di matematica: algebra elementare; equazioni e disequazioni algebriche di primo e secondo grado; logaritmi e potenze; trigonometria piana; geometria analitica nel piano. La didattica del Corso di Laurea in Chimica è articolata per ciascun anno di corso in due cicli di lezioni. Nell'AA 2014/2015, le lezioni del 1° ciclo avranno inizio il 6 ottobre 2014 e avranno termine il 16 gennaio 2015; le lezioni del 2° ciclo avranno inizio il 2 marzo 2015 e avranno termine il 12 giugno 2015. Altre informazioni sul corso di Laurea in Chimica possono essere reperite sulla pagina Internet del Corso di Laurea in Chimica (www.scienze.uniroma2.it). Lo studente acquisisce i crediti previsti per ogni corso di insegnamento (o insieme di essi), o attività formativa, con il superamento di una prova di esame. La frequenza ai corsi è libera (anche se fortemente consigliata), fatti salvi gli adempimenti didattici obbligatori (prove di verifica, esercitazioni di laboratorio). Lo studente iscritto ad un corso deve sostenere l'esame alla fine del corso stesso. Sono previsti almeno 5 appelli per ogni anno accademico: 2 alla fine di ogni ciclo didattico e 1 prima dell'inizio del nuovo anno accademico.

Iscrizione agli anni successivi

Per iscriversi al secondo anno di corso lo studente deve aver conseguito almeno 25 CFU nel

primo anno. Per iscriversi al terzo anno di corso lo studente deve avere acquisito complessivamente almeno 75 CFU, tra cui tutti i CFU del primo anno. Lo studente che non abbia conseguito i crediti minimi per l'iscrizione all'anno di corso successivo, dovrà iscriversi allo stesso anno come fuori-corso o ripetente, conservando i crediti acquisiti. Lo studente fuori-corso potrà anticipare alcuni crediti dell'anno successivo, previa autorizzazione del docente autorizzato.

Propedeuticità

L'esame di Chimica Generale è **propedeutico a tutti gli esami di chimica**. L'esame di Analisi Matematica I è propedeutico all'esame di Analisi Matematica II, di Fisica Generale I e di Chimica Fisica I e laboratorio. L'esame di Fisica Generale I è propedeutico all'esame di Fisica Generale II e Chimica Fisica I e laboratorio. L'esame di Fondamenti di Chimica Analitica è propedeutico all'esame di Chimica Analitica I. L'esame di Chimica Organica I con elementi di laboratorio è propedeutico all'esame di Chimica Organica II e all'esame di Chimica Biologica. L'esame di Chimica Fisica I e laboratorio è propedeutico all'esame di Chimica Fisica II. L'esame di Chimica Inorganica I è propedeutico all'esame di Chimica Inorganica II.

L'esame di Chimica Analitica II è propedeutico all'esame di Chimica Analitica III. L'esame di Fisica Generale II è propedeutico all'esame di Chimica Organica III. L'esame di Chimica Fisica II è propedeutico all'esame di Chimica Fisica III.

Gli esami di Chimica Organica I con elementi di laboratorio e Chimica Organica II sono propedeutici all'esame di Laboratorio di Chimica Organica. L'esame di Chimica Fisica I e laboratorio è propedeutico all'esame di Laboratorio di Chimica Fisica.

La valutazione della prova di esame degli insegnamenti avviene in trentesimi. Al voto d'esame finale possono contribuire come credito i voti conseguiti nelle prove in itinere. In tal caso gli studenti dovranno essere informati, all'inizio del corso, sul numero e sulle date delle prove in itinere previste e su come contribuiranno al voto finale. Per le attività di tirocinio e per le ulteriori attività non riconducibili ad insegnamenti, viene certificato l'avvenuto superamento della prova, con relativa valutazione, che può essere espressa con un giudizio di idoneità. Tutti gli esami sono valutati in trentesimi con eccezione di: Lingua straniera (inglese) e Prevenzione e sicurezza nei laboratori chimici valutati con idoneità.

Prova finale

Per conseguire il Diploma di Laurea in Chimica lo studente deve sostenere una prova finale, che consiste nella discussione di una relazione (scritta) in cui il candidato dimostri di saper affrontare e discutere una particolare problematica chimica. È obbligatoria la frequenza di un Laboratorio dell'Università oppure, previa autorizzazione del Consiglio di Dipartimento e sotto il controllo di un relatore scientifico, presso un Laboratorio di altro ente (pubblico o privato). Obiettivo della prova finale è la verifica della capacità del laureando di esporre e di discutere un argomento di carattere chimico, oralmente e per iscritto, con chiarezza e padronanza. La scelta del contenuto del lavoro e il suo svolgimento, che può prevedere attività pratiche di laboratorio e/o di tirocinio, devono avvenire con l'assistenza e sotto la responsabilità di un tutore che concorda con lo studente l'argomento oggetto della prova. La scelta va effettuata almeno tre mesi prima dello svolgimento della prova finale. La prova finale è pubblica e consiste nella stesura di un elaborato scritto e in una esposizione orale davanti ad una commissione di laurea. Per l'ammissione alla prova finale lo studente deve aver conseguito tutti i crediti formativi previsti dall'ordinamento didattico del corso. La valutazione finale è espressa in centodecimi, e comprende una valutazione globale del curriculum del laureando. Alla formazione del voto di laurea concorre: la valutazione della prova di esame, la media pesata dei voti ottenuti nelle attività formative valutate in trentesimi, compresi i voti conseguiti in esami superati presso altri corsi di studio e convalidati; le lodi ricevute nelle varie attività formative. Agli studenti che raggiungono il voto di laurea di 110 punti può essere attribuita la lode con voto unanime della Commissione.

Tutorato

Il Tutorato è finalizzato ad orientare ed assistere gli studenti lungo il corso degli studi, e a rimuovere gli ostacoli ad una proficua frequenza dei corsi, anche attraverso iniziative rapportate alle necessità, alle attitudini ed alle esigenze dei singoli. All'inizio di ogni Anno Accademico viene nominato un tutore per ogni studente immatricolato.

Programmi dei corsi

ANALISI MATEMATICA I - MAT/05

8 CFU

Prof.ssa S. Caprino

Numeri reali. Successioni numeriche. Elementi di algebra lineare. Elementi di geometria analitica. Funzioni reali di variabile reale. Teoria del limite. Calcolo differenziale e integrale. Integrali generalizzati. Approssimazione di Taylor.

Testi consigliati:

M. Bramanti, C. D. Pagani, S. Salsa "Matematica, calcolo infinitesimale e algebra lineare. Ed. Zanichelli.

P. Marcellini, C. Sbordone "Calcolo". Ed. Liguori.

ANALISI MATEMATICA II - MAT/05

8 CFU

Prof.ssa E. Prestini

Serie numeriche. Serie di funzioni. Funzioni di più variabili reali. Funzioni implicite. Integrali curvilinei e forme differenziali. Equazioni differenziali.

Testi consigliati

Bertch, Dal Passo, "Analisi Matematica" Zanichelli Editore.

BIOTECNOLOGIE E BIOCHIMICA APPLICATA - BIO/10

6 CFU

Prof.ssa A. M. Caccuri

Struttura degli acidi nucleici; sintesi del DNA, del RNA e delle proteine. Purificazione ed analisi del DNA e del RNA: elettroforesi, cromatografia di affinità, sequenziamento del DNA, PCR, RT PCR, microarray a DNA. La tecnologia del DNA ricombinante: uso di vettori di espressione e di enzimi di restrizione per la produzione di proteine ricombinanti in batteri e cellule eucariotiche. Purificazione ed analisi delle proteine: tecniche cromatografiche, centrifugative, elettroforetiche, spettroscopiche, spettrometria di massa, radioisotopiche, immunochimiche. Metodi per dosare l'attività enzimatica. Cenni su cellule eucariotiche e trasduzione del segnale. Colture cellulari primarie e stabilizzate. Analisi dell'effetto di farmaci su colture di cellule tumorali.

CHIMICA ANALITICA I - CHIM/01

6 CFU

Dott.ssa L. Micheli

(insegnamento fruito dal corso di laurea in Chimica Applicata)

Equilibri chimici in soluzione: acido-base, complessazione, precipitazione, ossidoriduzione. Costanti di equilibrio. Calcolo del pH per sistemi acquosi diluiti. Introduzione all'analisi chimica qualitativa inorganica. - Norme di sicurezza in un laboratorio chimico e prevenzione dei rischi di laboratorio. - Generalità sulle operazioni di laboratorio. - Aspetti teorici dei processi di dissoluzione e precipitazione. - Idrolisi dei sali: proprietà acido-base di anioni, cationi e sali. - Analisi degli anioni. - Analisi dei cationi (analisi sistematica classica con suddivisione in 5 gruppi analitici). - Guida all'identificazione di sostanze inorganiche incognite). - Analisi di tracce: i saggi limite. Concetti generali con riferimento in particolare ai saggi limite riportati in F.U. - Teoria del colore: relazione tra il colore e le proprietà elettroniche di ioni e molecole. - Cenni sulle implicazioni biochimiche, chimico-farmaceutiche e tossicologiche delle sostanze inorganiche oggetto d'analisi.

Esercitazioni di laboratorio (3 prove in itinere in laboratorio, a posto singolo)

Riconoscimento cationi del I gruppo

Riconoscimento cationi del III gruppo

Riconoscimento anioni

Prova incognita, con riconoscimento di due cationi ed un anione incognito in un campione solido

Testi consigliati

Vomero – Chimica Analitica e analisi degli elementi, Casa editrice Aracne

A. Araneo, Chimica Analitica Qualitativa, Casa Editrice Ambrosiana, Milano. –

G. Charlot, Analisi Chimica Qualitativa, Piccin Editore, Padova. –

F. Savelli, O. Bruno, Analisi Chimico Farmaceutica, Piccin Editore, Padova.

CHIMICA ANALITICA II - CHIM/01

6 CFU

Dott.ssa F. Arduini

(insegnamento fruito dal corso di laurea in Chimica Applicata)

Accuratezza, linearità di risposta, sensibilità, selettività di un metodo analitico. Errori sistematici e casuali, test Q. Gravimetria, titolazioni acido-base, titolazioni di precipitazione, titolazioni di complessazione, titolazioni redox. Il corso prevede esperienze di laboratorio in cui lo studente deve calcolare la quantità di analita presente in concentrazione incognita nel campione mediante titolazioni volumetriche o esperimenti di gravimetria.

Testi consigliati

Chimica analitica, G. D. Christian, Piccin Nuova Libreria

Chimica Analitica Quantitativa, E.Bottari, M.R.Festa La Sapienza Editrice, Roma.

CHIMICA ANALITICA III - CHIM/01

8 CFU

Prof.ssa D. Moscone

Metodi elettrochimici di analisi. Potenziometria, Polarografia, Amperometria, Tecniche pulstate e di stripping. Sensori chimici e biosensori.

Metodi spettrofotometrici di analisi. Misure di assorbimento ed emissione. Legge di Lambert-Beer, Deviazioni dalla legge di L-B. Assorbimento Atomico. Spettroscopia di emissione atomica. Fluorimetria.

Metodi cromatografici di analisi. Estrazione con solventi. Cromatografia classica su colonna. Cromatografia di scambio ionico. Cromatografia di permeazione su gel. Cromatografia su carta e strato sottile. Gascromatografia. HPLC.

Esercitazioni pratiche di laboratorio

Testi consigliati

Cozzi, Protti, Ruaro "Elementi di analisi chimica strumentale" Ed. Zanichelli; Skoog, West, Holler, Crouch, "Fondamenti di chimica analitica", Ed. Edises.

CHIMICA BIOLOGICA - BIO/10

9 CFU

Prof. G. Ricci

Aminoacidi e peptidi. Il legame peptidico. Le proteine: struttura primaria, secondaria, terziaria e quaternaria. Relazione struttura-funzione: emoglobina e mioglobina. Cooperatività di legame. Gli enzimi: struttura e funzione. Coenzimi e vitamine. Termodinamica della catalisi enzimatica. Cinetica enzimatica dello stato stazionario. Cenni sulla cinetica dello stato prestazionario. Individuazione di intermedi di reazione. Definizione del meccanismo catalitico di alcuni enzimi modello. Regolazione enzimatica. Enzimi allosterici. Bioenergetica. Reazioni redox di interesse biologico. Fosforilazione ossidativa. Catabolismo e anabolismo glucidico e lipidico. Biosintesi e vie degradative di alcuni aminoacidi (cisteina, metionina, fenilalanina, tirosina). Destino metabolico dell'ammoniaca. Fotosintesi.

CHIMICA FISICA I E LAB - CHIM/02

10 CFU

Mod. I Prof. G. Paradossi 7 CFU

Termodinamica. Variabili e funzioni di stato. Processi reversibili e irreversibili. Teoria cinetica dei gas. Gas reali. 1° Principio della termodinamica. Termochimica. 2° Principio della termodinamica. Definizione di Entropia. Disuguaglianza di Clausius. Definizione statistica dell'entropia. 3° Principio della termodinamica. Transizioni di stato in sistemi ad un componente. Equazione di Clausius Clapeyron. Lavoro massimo e Lavoro utile. Energia Libera di Helmholtz. Energia Libera di Gibbs. Sistemi a piu' componenti. Grandezze parziali molari e loro proprietà. Potenziale chimico. Soluzioni. Definizioni di stato di riferimento di solvente e di soluto. Attività e coefficienti di attività. Soluzioni ideali. Interpretazione statistica dell'entropia di mescolamento. Soluzioni regolari atermiche. Sistemi a piu' componenti multifasici. Regola delle fasi. Lacune di miscibilità. Solubilità. Diagrammi di fase a più componenti. Eutettico. Proprietà colligative. Reazioni

chimiche in fase gassosa. Condizione di equilibrio. Costante di equilibrio. Dipendenza della costante di equilibrio dalla temperatura. Equilibri eterogenei.

Mod. II Dott.ssa E. Chiessi 3 CFU

Trattamento dei dati sperimentali. Elementi di teoria dell'errore.

Cinetica chimica:

Definizione operativa di velocità di reazione. Legge cinetica empirica. Ordine di reazione e molecolarità. Velocità iniziale. Cinetiche del primo e secondo ordine. Cinetica di reazioni reversibili del primo ordine. Cinetica di reazioni consecutive del primo ordine. Approssimazione dello stato stazionario. Catalisi enzimatica. Energia di attivazione e legge di Arrhenius.

Teoria e parte sperimentale sulle seguenti esperienze di laboratorio:

studio cinetico dell'idrolisi basica del p-nitrofenilacetato;

determinazione dell'entalpia di evaporazione di un liquido puro;

determinazione dell'entalpia di fusione dello stagno mediante calorimetria a scansione differenziale;

studio della lacuna di miscibilità tra tributilfosfato e glicole etilenico;

studio termodinamico della reazione di inclusione del colorante fenolftaleina nella β -ciclodestrina in soluzione acquosa.

CHIMICA FISICA II - CHIM/02

10 CFU

Prof. A. Palleschi

Principi e postulati della meccanica quantistica. Applicazioni: particella nella scatola a pareti rigide; oscillatore armonico; rotatore rigido; spin. Principio di Pauli. Atomo idrogenoide. Teorema variazionale. Atomo di elio. Termodinamica statistica. Insiemi canonico e microcanonico. Funzione di ripartizione e grandezze termodinamiche. Statistica di Boltzmann. Capacità termica e immagazzinamento dell'energia. Equilibri chimici in fase gassosa. Teoria dello stato di transizione.

Testi consigliati

B. Pispisa: Appunti di termodinamica Statistica

A. Palleschi: Appunti di Chimica Fisica II

P.W. Atkins, R.S. Friedman: Meccanica Quantistica Molecolare, Zanichelli Ed.

CHIMICA FISICA III - CHIM/02

6 CFU

Prof. M. Venanzi

Interazione radiazione-materia: modello semiclassico e trattazione perturbativa. Momento di transizione. Spettroscopia rotazionale: molecole biatomiche e symmetric tops. Regole di selezione. Spettroscopia vibrazionale di molecole biatomiche e poliatomiche. Vibrazioni normali. Spettroscopia IR a trasformata di Fourier. Struttura atomica. Interazione spin-orbita. Effetto Zeeman. Accoppiamento di momenti angolari e classificazione degli stati elettronici. Accoppiamento Russell-Sanders e jj. Transizioni elettroniche in molecole biatomiche. Progressioni vibrazionali. Struttura rotazionale fine. Principio Franck-Condon. Energia di dissociazione. Rilassamento energetico. Esperienze di laboratorio.

Testi consigliati

C. N. Banwell Fundamentals of Molecular Spectroscopy

P. F. Bernath Spectra of Atoms and Molecules

M. Venanzi Appunti di Lezione

CHIMICA GENERALE - CHIM/03

14 CFU

mod. I Dr. D. Monti 10 CFU

mod. 2 Prof. P. Tagliatesta 4 CFU

Introduzione alla Teoria Atomica. Il principio di indeterminazione di Heisenberg, l'equazione d'onda di Schrödinger e la struttura dell'atomo di idrogeno. I numeri quantici. Orbitali atomici e loro livelli energetici. Il principio dell'Aufbau. Gli atomi polielettronici e loro configurazione elettronica. Relazione tra configurazioni elettroniche degli elementi e loro proprietà. Raggi atomici, raggi ionici. La Tavola Periodica. Il concetto di mole, massa atomica e molecolare. Energia di ionizzazione ed affinità elettronica. Il concetto di elettronegatività. Il legame chimico: ionico, covalente. Teoria del legame di valenza. Ibridazione e risonanza. Strutture di molecole semplici; molecole biatomiche omonucleari ed eteronucleari. Descrizione della struttura di semplici molecole poliatomiche di importanza fondamentale (strutture dei più comuni acidi e basi). Concetto di numero di ossidazione e di carica formale. Lunghezza, angolo e forza di legame.

Introduzione alla teoria degli orbitali molecolari. Legame metallico (cenni); esempi di struttura di alcune fasi condensate (solidi ionici, covalenti, molecolari). Le forze intermolecolari: ione-dipolo, dipolo-dipolo, interazioni tra dipoli indotti (interazioni di Van der Waals e forze di dispersione di London). Il legame idrogeno: natura ed effetto sulla struttura di alcune fasi condensate. Teoria acido-base di Lewis (cenni). I gas, equazione di stato dei gas ideali ed applicazioni. Cenni di teoria cinetica dei gas. I Principi della Termodinamica ed applicazioni. L'equilibrio chimico. Relazione tra energia libera e costanti di equilibrio (K_p , K_c , K_x , K_n). Studi degli equilibri chimici in fase gassosa omogenea e in fase eterogenea. Equilibri omogenei in soluzione acquosa. Teorie acido-base ed applicazioni. Definizione di pH. Autoprotolisi dell'acqua. Forza di acidi e basi. Relazione tra struttura e forza acida o basica. Studio del comportamento acido-base di alcuni sali. Soluzioni tampone. Sali poco solubili ed equilibri di solubilità. Entalpie di soluzione e di idratazione degli ioni, loro relazione con la solubilità di composti ionici. Reazioni di ossido-riduzione. Potenziali elettrodi e forza elettromotrice di una cella elettrochimica. Potenziali standard. La legge di Nernst e suo significato termodinamico. Alcuni esempi di pile ed applicazioni. L'elettrolisi; leggi di Faraday. Cenni di Cinetica chimica; equazione di Arrhenius. Il ruolo dei catalizzatori nelle reazioni chimiche. I gas reali, equazione di van der Waals. L'equilibrio fisico: concetto di tensione di vapore e legge di Clapeyron. Diagrammi di stato (H_2O , CO_2). La legge di Raoult. Soluzioni ideali e non ideali. Proprietà colligative. Cenni di Chimica inorganica: Proprietà generali chimico-fisiche e di reattività degli elementi dei gruppi principali e di gas nobili. Problemi di stechiometria e calcoli chimici come supporto alla comprensione ed approfondimento dei concetti esposti.

Testi consigliati

P. Atkins, L. Jones, Principi di Chimica, Ed. Zanichelli. P. Silvestroni, "Fondamenti di Chimica", Ed. Veschi, Roma.

M. Schiavello, L. Palmisano, "Fondamenti di Chimica", EdISES.

F. Cacace, M. Schiavello, "Stechiometria", Ed. Bulzoni. I. Bertini, C. Luchinat, F. Mani, "Stechiometria", Casa Ed. Ambrosiana

CHIMICA INORGANICA I - CHIM/03

6 CFU

Prof. P. Tagliatesta

(insegnamento fruito dal corso di laurea in Chimica Applicata)

Struttura atomica e molecolare: Orbitali atomici; orbitali molecolari in molecole biatomiche; costruzione e simmetria degli orbitali molecolari in molecole poliatomiche. Sistematica inorganica: idrogeno e suoi composti; elementi e composti dei gruppi principali (proprietà generali, preparazione, reazioni).

Meccanica quantistica: principi. Elettrone nella scatola. Atomo di Bohr. Numeri quantici. Funzioni d'onda. Equazione di Schroedinger. Atomo di idrogeno. Atomi polielettronici ed approssimazioni. Molecola H_2^+ . Molecola H_2 . Molecole biatomiche.

Teoria MO ed applicazioni a molecole semplici. diagrammi di correlazione. Orbitali molecolari. Complessi dei metalli di transizione: teorie.

Diagrammi di correlazione dei complessi. Principio di Jahn-Teller.

Back-bonding. Catalisi omogenea: principi e reazioni di interesse industriale.

Testi consigliati

Whitten, Chimica inorganica- Piccin editore

Atkins, Chimica Inorganica-Zanichelli Editore

CHIMICA INORGANICA II - CHIM/03

6 CFU

Dr.ssa M. Carbone

L'atomo di Bohr e i principi di quantizzazione. L'atomo di Sommerfeld e i numeri quantici secondari. Definizione dell'equazione agli autovalori. Rappresentazioni quantomeccaniche. Proprietà degli operatori: linearità e calcolo del commutatore. Costruzione degli operatori. Postulati di quantomeccanica. La particella nella scatola. L'equazione di Schroedinger per gli atomi idrogenoidi: soluzione in coordinate polari e Atomi polielettronici e costanti di schermo. Numero quantico J . Accoppiamento $j-j$. Simboli di termine atomici. Teorema variazionale. Teoria della banda di valenza. Orbitali Molecolari (OM) con il metodo LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals): calcolo dei coefficienti di combinazione lineare per molecole omo- ed eteronucleari. Metodi OM e VB per molecole biatomiche omonucleari ed eteronucleari. Calcolo dei coefficienti di combinazione di orbitali ibridi. Simboli di termine Molecolari. Molecole poliatomiche: BeH_2 , CO_2 , BF_3 , NH_3 , CH_4 , NO_2 , H_2O . Teoria dei gruppi: elementi di simmetria, gruppi puntuali, rappresentazioni irriducibili e riducibili. Complessi di coordinazione: descrizione dei numeri

ci coordinazione più comuni, nomenclatura, chiralità e assegnazione della configurazione assoluta di complessi ottaedrici chelati. Teoria del campo cristallino, degli OM e VB applicata a complessi ottaedrici, tetraedrici e quadrato-piani. Complessi ottaedrici ad alto e basso spin. Legami σ e π nei complessi ottaedrici, serie spettrochimica. Parametri di Racah. Simboli di termine Spettroscopici. Regole di selezione nelle transizioni d-d. Transizione LMCT, MLCT. Solidi Ionici e Metallici, fattore di impaccamento. Costante di Madelung in solidi ionici. Difetti stechiometrici e non stechiometrici. Legami metallici, teoria dell'elettrone quasi libero. Teoria delle bande. Tight binding.

CHIMICA ORGANICA I CON ELEMENTI DI LABORATORIO - CHIM/06 10 CFU
Prof.ssa B. Floris

Introduzione alle molecole organiche e ai gruppi funzionali. Nomenclatura. Rappresentazioni delle molecole. Forze intermolecolari. Correlazioni struttura-proprietà fisiche. Spettroscopia UV-vis e IR. Solventi, solubilità. Risonanza ed aromaticità. Proprietà acido-base di molecole organiche (Brønsted e Lewis). Metodi di isolamento, analisi e purificazione. Spettrometria di massa. Conformazioni e Configurazioni (Stereoisomeri geometrici ed ottici). Introduzione alla cinetica ed al meccanismo di reazione. Reazioni delle principali classi organiche: Alcani e cicloalcani, Alogenuri alchilici, Alcoli, Eteri, Ammine, Alcheni, Alchini, Dieni Composti aromatici. Composti carbonilici e loro derivati azotati, Acidi carbossilici e loro derivati (esteri, ammidi, anidridi, alogenuri acilici, nitrili). Cenni sulle principali tecniche di indagine spettroscopica. Introduzione alla spettrometria NMR (^1H e ^{13}C).

Testi consigliati

Per la Chimica Organica uno da scegliere tra i seguenti (elencati in ordine alfabetico).

W. H. Brown, Chimica Organica, EdiSES,

P. Y. Bruice, Chimica Organica, EdiSES;

M. Loudon, Chimica Organica EdiSES;

J. McMurry, Chimica Organica, Piccin;

P. Vollhardt, Chimica Organica, Zanichelli.

Per il laboratorio: Marco d'Ischia, La Chimica Organica in Laboratorio, Ed. Piccin.

CHIMICA ORGANICA II - CHIM/06 10 CFU
Prof. M. Bietti.

Alchilazione di Enolati e di altri Nucleofili al Carbonio

Reazioni dei Nucleofili al Carbonio con i Composti Carbonilici

Interconversione, Protezione e Deprotezione di Gruppi Funzionali mediante sostituzione

Addizioni Elettrofile a Doppi Legami Carbonio-Carbonio

Riduzione di Legami Multipli Carbonio-Carbonio, Gruppi Carbonilici e altri Gruppi Funzionali

Reazioni di Cicloaddizione

Reagenti Organometallici del Li e Mg

Reazioni che Coinvolgono Carbeni, Nitreni ed Intermedi Correlati

Ossidazioni

Esempi di Sintesi Multistadio

Lipidi

Carboidrati

Composti Eterociclici

Amminoacidi, Peptidi, Proteine e Acidi Nucleici

Testi consigliati

Introduzione alla Sintesi Organica

F. A. Carey, R. J. Sundberg Advanced Organic Chemistry Part B: Reactions and Synthesis 5th edition, Springer, 2007

Biomolecole

W. H. Brown, C. S. Foote, B. L. Iverson Chimica Organica 3a edizione, EdiSES, 2005

K. P. C. Vollhardt, N. E. Schore Chimica Organica 3a edizione, Zanichelli, 2005

CHIMICA ORGANICA III - CHIM/06 6 CFU

Prof. D. Cicero

Spettroscopia di Risonanza Magnetica Nucleare: Introduzione. Lo spin nucleare e il momento magnetico. Il chemical shift. Frequenza di Larmor. Legge di Lenz. Effetti di schermo e deschermo. Interazioni tra spin: costante dipolare e costante scalare. Origine della costante scalare. Rilassamento spin-spin: origine ed effetto sullo spettro. Rilassamento e dimensione molecolare. Rilassamento spin-lattice: origine ed effetto sullo spettro. L'andamento vettoriale della magnetizzazione nel sistema ruotante: chemical shift e costante di accoppiamento. La frequenza di riferimento per lo spettro. La trasformata di Fourier. Analisi di spettri ¹H. Spettroscopia di ¹³C. L'abbondanza naturale del ¹³C. Accoppiamenti ¹³C-¹H. Chemical shift. Tipi di carboni: spettri disaccoppiati, l'esperimento DEPT. Problemi di analisi strutturale utilizzando dati di ¹³C NMR. Il test di protoni attaccati.

Spettrometria di Massa: Introduzione. Il concetto della spettrometria di massa. Lo spettrometro di massa. Tecniche di introduzione del campione. Tecniche di ionizzazione: ionizzazione elettronica, chimica, bombardamento per atomi veloci, elettrospray, MALDI.

Analizzatori di massa. Concetti di risoluzione, trasmissione, limite superiore di massa. Settori magnetici ed elettrici. Quadrupoli. Tempo di volo. Ione-ciclotrone. Analizzatori ibridi. Trappola ionica quadrupolare. Sistemi ibridi. Analisi comparativa dei diversi analizzatori. Interpretazione di spettri di massa ottenuti con ionizzazione elettronica: l'approccio empirico. Analisi di spettri: strategie e regole. Pattern isotopico. Calcolo dell'intensità relativa dei picchi dovuti agli isotopi. Misura della massa esatta. Applicazioni. Risoluzioni di problemi strutturali con dati di spettroscopia di massa.

Analisi di spettri di NMR e Massa: Risoluzione di problemi utilizzando dati di ¹H-NMR, ¹³C-NMR e massa.

FISICA GENERALE I - FIS/01**8 CFU****Dott.ssa A. Filabozzi**

Fisica e misura. Cinematica del punto materiale. Dinamica del punto materiale. Reazioni vincolari e attrito statico e dinamico. Forze elastiche e moto oscillatorio. Lavoro ed energia. Forze conservative. Energia potenziale. Momento angolare. Dinamica del corpo rigido. Momento di inerzia. Cenni di statica. Gravitazione. Meccanica dei fluidi..

Testi consigliati

Mazzoldi, Nigro, Voci - Elementi di Fisica, Volume I, Edises

Serway, Jewett - Fisica, per Scienze e l'ingegneria, Volume I, Edises

Focardi, Massa, Uguzzoni, Villa - Fisica Generale, volume I, II edizione, Casa Ed. Ambrosiana

FISICA GENERALE II - FIS/01**8 CFU****Dr. E. Santovetti**

Elettricità e magnetismo: Campi elettrici. La legge di Gauss. Il potenziale elettrico. Capacità e dielettrici. Corrente e resistenza. Circuiti in corrente continua. Campi magnetici. Sorgenti di campo magnetico. La legge di Faraday. Induttanza. Circuiti in corrente alternata. Onde elettromagnetiche.

Luce ed ottica: La natura della luce e le leggi dell'ottica geometrica. La formazione dell'immagine (specchi, diottri, lenti sottili). Interferenza delle onde luminose

Fisica moderna: La relatività (dilatazione del tempo e contrazione della lunghezza, trasformazioni di Lorentz e della velocità).

FONDAMENTI DI CHIMICA ANALITICA - CHIM/01**6 CFU****Prof. G. Palleschi**

Soluzioni, solventi e soluti. Concentrazioni: Percento in peso p/p, Percento in Volume p/v; percento volume/volume. Molarità e formalità, molalità, normalità. Concetto di equivalente, peso molecolare e peso equivalente. Esercizi in classe. Equilibrio chimico

Acidi forti ed acidi deboli. Basi forti e basi deboli. Calcolo del pH di acidi forti e deboli senza approssimazioni e con il metodo delle approssimazioni successive. Bilancio delle masse ed elettroneutralità. Attività e concentrazione. Forza ionica di una soluzione.

Tampone e calcolo del pH di una soluzione tampone con formula senza approssimazioni e con la formula approssimata. Capacità tampone. Esercizi.

Acidi diprotici e triprotici, calcolo del pH. Anfoliti calcolo del pH. Solubilità e prodotto di solubilità. Elettroliti forti e deboli. Calcolo della solubilità dal prodotto di solubilità ed influenza del pH sulla solubilità. Complessi, costante di stabilità e condizionale. Esercizi
Sistemi di ossidoriduzione . Calcolo della forza elettromotrice da potenziali standard.
Elettrolisi. Esercizi.

Testi Consigliati

Gary Christian, Piccin, Skoog and West Analytical chemistry

INGLESE - L-LIN/12

4 CFU

Docente da definire

MAIN OBJECTIVES. The course aims at the consolidation and improvement of the four language skills (reading, writing, listening, and speaking) through a wide range of activities in the field of science. **COURSE CONTENT.** The lessons will be organized around various thematic units based on the course textbook and articles taken from authentic sources such as newspapers, the internet, specialized journals and hand-outs distributed in class. Each unit will focus on enhancing general language structures, vocabulary and functions on the basis of the readings and inclass discussions. Particular attention will be given to improving reading comprehension and summarizing skills.

LABORATORIO DI CHIMICA ANALITICA - CHIM/01

6 CFU

Prof.ssa D. Moscone

Cenni di Biochimica riguardanti gli enzimi. Tecniche analitiche: concetti base della spettrofotometria e cromatografia.

Biosensori e loro applicazione in campo. Misure spettrofotometriche di sostanze di interesse clinico ed alimentare sfruttando reazioni enzimatiche e/o titolazioni analitiche.

Tecniche Immunoenzimatiche (ELISA) per la determinazione di composti di interesse clinico.

Misure cromatografiche di analiti di interesse clinico ed alimentare.

6 Esperienze di laboratorio:

Determinazione dell'acido glutammico nel dado da cucina mediante metodo colorimetrico bienzimatico (via spettrofotometrica)

Determinazione dell'immunoglobuline nel sangue umano via ELISA spettrofotometrico

Determinazione della Teofillina nel siero umano con il metodo dello standard interno via cromatografica

Determinazione dei perossidi nell'olio (via spettrofotometrica)

Determinazione degli antociani totali espressi come malvidina-3-monoglucoside (via spettrofotometrica)

Determinazione dell'acido benzoico in bevande a base di frutta con estrazione SPE (via cromatografica).

LABORATORIO DI CHIMICA FISICA - CHIM/02

6 CFU

Dr.ssa E. Chiessi

Il corso si basa sullo svolgimento di esperienze di laboratorio che affrontano problemi di termodinamica e cinetica chimica con metodi chimico-fisici. Per ciascuna esperienza saranno svolte delle lezioni in aula per illustrare le basi teoriche del problema affrontato e della tecnica sperimentale adottata, le modalità di svolgimento e l'elaborazione dei risultati.

I sistemi studiati saranno prevalentemente di tipo organico/biologico. Le tecniche utilizzate saranno: spettrofotometria UV-visibile; calorimetria a scansione differenziale; spettrofluorimetria; visualizzazione molecolare mediante software specifici. Si prevede anche lo svolgimento di un'esperienza di simulazione al calcolatore.

Lo studente è tenuto a consegnare una relazione dettagliata su ciascuna esperienza svolta. La prova d'esame consiste nella discussione critica dei risultati ottenuti per una delle esperienze.

Testi Consigliati

Atkins Chimica Fisica.

Dispense fornite dal Docente.

Articoli scientifici.

LABORATORIO DI CHIMICA ORGANICA - CHIM/06

6 CFU

Dott. P. Galloni

(insegnamento fruito dal corso di laurea in Chimica Applicata)

