



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DI PADOVA

SCUOLA DI SCIENZE

Bollettino Notiziario

Anno Accademico 2017/2018

Laurea in Chimica (Ord. 2014)

Curriculum: Corsi comuni

CHIMICA ANALITICA 1

(Titolare: Prof. PAOLO PASTORE)

Periodo: I anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 40A+10E+48L; 10,00 CFU

Prerequisiti :

Acquisizione dei contenuti dei corsi di Matematica e di Chimica Generale ed Inorganica.

Per quanto riguarda il primo avere familiarità con alcune funzioni matematiche che verranno utilizzate nel corso, quali logaritmi ed esponenziali.

Per quanto riguarda il secondo conoscere il concetto di elemento, di composto, di mole, di massa atomica e molare, di equilibrio chimico. Conoscenza della nomenclatura dei composti inorganici semplici. Capacità di eseguire semplici calcoli stechiometrici e di bilanciare correttamente le equazioni di reazione.

Conoscenze e abilità da acquisire :

Il corso si propone di fornire agli studenti i mezzi concettuali per razionalizzare e per comprendere il significato degli equilibri chimici in soluzione acquosa con particolare riferimento alle reazioni acido-base, di formazione di complessi, redox e quelle di precipitazione.

Fornisce inoltre la capacità di effettuare l'analisi chimica quantitativa condotta con metodi "classici" inclusa la previsione e la valutazione e l'elaborazione dei risultati con l'ausilio di estesa attività di laboratorio.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

In aula, a fianco della razionalizzazione matematica degli equilibri in soluzione e degli argomenti correlati, l'apprendimento viene facilitato per mezzo della visualizzazione grafica degli equilibri stessi mediante l'uso di diagrammi logaritmici anche con l'ausilio di mezzi informatici.

In laboratorio, l'apprendimento viene facilitato dalla presenza di numerose figure professionali a fianco del docente.

Contenuti :

Lezioni d'aula.

Obiettivi e metodi della chimica analitica. Razionalizzazione degli equilibri in soluzione anche per mezzo di metodi grafici: equilibri acido-base, di formazione di complessi, di precipitazione, ossidoriduttivi. Trattamento rigoroso ai fini delle applicazioni analitiche. Analisi volumetrica: trattamento teorico delle curve di titolazione basate sui diversi tipi di equilibri. Metodi di individuazione del punto di fine.

Attività di laboratorio

Uso di semplice strumentazione di laboratorio: vetreria calibrata e non, bilancia tecnica ed analitica, pH-metro, stufa, muffola.

Titolazioni acido-base, di formazione di complessi, di precipitazione, redox. Titolazioni potenziometriche e con indicatore. Analisi gravimetrica. Calibrazione. Quaderno di laboratorio. Analisi statistica dei risultati sperimentali.

Modalità di esame :

L'esame si compone di una prova scritta ed una orale.

Nella prova scritta lo studente deve risolvere 3 esercizi riguardanti il corso d'aula, rispondere ad una sezione con risposta vero/falso, deve svolgere una sezione riguardante domande sull'attività di laboratorio.

Nella prova orale lo studente deve rispondere a domande di teoria ma viene anche valutata l'attività svolta in laboratorio.

Criteri di valutazione :

Il voto finale è espresso in trentesimi ed è la media delle votazioni delle prove scritta e orale. L'esame viene superato solo se entrambe le prove sono state superate con un punteggio di almeno 18/30.

Per quanto riguarda la valutazione della prova scritta ogni esercizio prevede l'acquisizione di un punteggio da 0 a 6 punti.

Testi di riferimento :

Di_Marco, Valerio; Pastore, Paolo; Bombi, Giorgio G., Chimica analitica. Trattazione algebrica e grafica degli equilibri chimici in soluzione acquosa. Napoli: EdiSES, 2015

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Per ogni attività sarà fornito materiale didattico adeguato sotto forma di testi consigliati, dispense, presentazioni power point ma anche in formato multimediale utilizzando le potenzialità dei siti web istituzionali.

CHIMICA ANALITICA 2

(Titolare: Prof. PAOLO PASTORE)

Periodo: III anno, 1 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 48A+48L; 10,00 CFU

Prerequisiti :

È ritenuto di estrema importanza didattica avere acquisito conoscenze significative nel campo della Chimica Generale e Inorganica, Chimica Organica e Chimica Fisica nonché avere superato l'esame di Chimica Analitica I.

Conoscenze e abilità da acquisire :

Acquisizione dei principi fondamentali delle più importanti tecniche analitiche strumentali e fornire le basi per una corretta utilizzazione della strumentazione e del dato analitico.

Il corso 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 sia teorico che pratico nel campo ambientale alimentare ed industriale. Inoltre vuole fornire una conoscenza di base dei principali metodi statistici per il trattamento dei dati analitici.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

In aula, l'apprendimento viene facilitato per mezzo della visualizzazione degli argomenti trattati mediante l'uso di mezzi informatici adeguati.

In laboratorio l'apprendimento viene facilitato dalla presenza di numerose figure tecnico-professionali a fianco del docente.

Contenuti :

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. 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 ionico, 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. 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 gas-cromatografo-SM: Sistemi di introduzione del campione. Metodi di ionizzazione e procedure. Ionizzazione elettronica (EI), ionizzazione chimica (CI), con laser (MALDI).

Trattamento statistico dei dati analitici: a) definizioni di base; b) distribuzione dell'errore e limite di rivelabilità; c) test statistici; d) regressione con il metodo dei minimi quadrati; e) interferenze ed effetto matrice; f) analisi quantitativa tramite retta di taratura (calibrazione esterna), metodo delle aggiunte standard, uso dello standard interno. Le esperienze di laboratorio riguardano le seguenti tecniche: gas-cromatografia, HPLC, cromatografia ionica, spettrofotometria UV-VIS, spettroscopia di assorbimento atomico, potenziometria con ISE.

Modalità di esame :

L'accertamento finale consiste in una prova orale che include un accertamento sulle esperienze di laboratorio.

Criteri di valutazione :

Il voto finale è espresso in trentesimi ed è superato con un punteggio di almeno 18/30.

Testi di riferimento :

Skoog, Douglas, Fondamenti di chimica analitica di Skoog e WestDouglas A. Skoog ... [et al.][edizione italiana a cura di Luigia Sabbatini]. Napoli: EdiSES, 2015

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Oltre ai testi consigliati, dispense fornite allo studente, sia per la parte di statistica che per la parte che riguarda le esperienze di Laboratorio.

CHIMICA BIOLOGICA

(Titolare: Prof.ssa DONATELLA CARBONERA)

Periodo: Il anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU

Prerequisiti :

Oltre a Chimica Organica I e II, sono necessarie conoscenze di base di termodinamica e cinetica.

Conoscenze e abilità da acquisire :

Fornire le conoscenze di base sulla struttura e funzione delle molecole coinvolte nei processi chimici degli esseri viventi (in particolare proteine e acidi nucleici); dare le informazioni generali sull'organizzazione delle reazioni metaboliche all'interno della cellula.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni frontali con esercizi in aula su argomenti specifici supportate da utilizzo di slides.

Contenuti :

Generalità sull'organizzazione della cellula. Eucarioti e procarioti. Nucleotidi e acidi nucleici. DNA, RNA. Il codice genetico. Proteine. Struttura I, II, III, IV. Proteine globulari e fibrose. Cenni alle tecniche di purificazione di proteine. Motivi che determinano la stabilità della struttura tridimensionale, denaturazione. Esempi di strutture tridimensionali di proteine. Cooperatività e allosteria. Il trasporto dell'ossigeno: mioglobina ed emoglobina; grafico di Hill; modello MWC; motivi strutturali; effetto Bohr; anemia falciforme. Esempi di relazione struttura-funzione: proteasi, anticorpi. Enzimi. Cinetica di Michaelis-Menten; inibitori competitivi e non. Enzimi allosterici: controllo e attivazione. Lipidi. Membrane biologiche. Polisaccaridi. Bioenergetica. Il flusso dell'energia negli organismi viventi; I composti ricchi di energia; il significato energetico dei cicli metabolici; ossidoriduzioni biologiche; la fotosintesi; la fosforilazione ossidativa.

Modalità di esame :

L'esame consisterà in una prova scritta.

Criteri di valutazione :

Verranno valutate l'acquisizione delle proprietà generali della chimica biologica e la capacità di applicare ed utilizzare le conoscenze fornite dal corso a soluzioni di problemi specifici.

Testi di riferimento :

D.Voet, J. G. Voet, C.W. Pratt, *Fondamenti di Biochimica.* : Zanichelli,
L. Streyer, *Biochimica.* : Zanichelli,
Eventuali indicazioni sui materiali di studio :
Oltre ai testi suggeriti verranno fornite le slides utilizzate dalla docente nelle lezioni frontali.

CHIMICA COMPUTAZIONALE

(Titolare: Prof.ssa LAURA ORIAN)

Periodo: I anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU

Prerequisiti :

Nozioni di base dei corsi di chimica del triennio.

Conoscenze e abilità da acquisire :

Il corso intende fare conoscere le principali applicazioni della chimica computazionale e sviluppare la consapevolezza dei metodi computazionali per la previsione e interpretazione delle proprietà strutturali e dinamiche delle molecole.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni frontali e brevi esercitazioni/dimostrazioni.

Contenuti :

Il corso intende presentare agli studenti una panoramica delle soluzioni che il chimico moderno ha a disposizione per risolvere problemi utilizzando

strumenti informatici, illustrando le caratteristiche e le implementazioni delle diverse metodologie

per lo studio di problematiche generali come:

- calcolo di strutture elettroniche;
- ottimizzazione di geometrie molecolari;
- previsione di grandezze termochimiche, spettroscopiche, strutturali e dinamiche;
- descrizione di proprietà di materiali mediante tecniche integrate.

Sono previsti alcuni cenni ai principi base della chimica quantistica, finalizzati alla comprensione degli aspetti principali delle diverse metodologie .

Il corso è centrato su alcuni esempi tratti dall'esperienza chimica computazionale in ambito chimico-fisico, chimico-inorganico e chimico-organico; all'interno del corso sono collocate alcune dimostrazioni e/o esercitazioni da svolgersi nell'aula di informatica e con l'uso delle facilities computazionali del Dipartimento di Scienze Chimiche. Durante il corso potranno infine previsti seminari su invito di docenti italiani e stranieri attivi nell'ambito delle scienze molecolari computazionali.

Modalità di esame :

Esame orale, con la possibilità di concordare la discussione di un problema specifico con il docente e di discutere un breve elaborato.

Criteri di valutazione :

La valutazione sarà basata sul grado di comprensione delle metodologie computazionali e delle loro applicazioni a problematiche chimico-fisiche correnti.

Testi di riferimento :

C. J. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry.* UK: John Wiley & Sons, 2004

F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry.* UK: John Wiley & Sons, 1999

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Dispense e appunti di lezione.

CHIMICA DEI COLLOIDI

(Titolare: Prof.ssa SILVIA GROSS)

Periodo: I anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU

Prerequisiti :

Corsi fondamentali della Laurea in Chimica e Chimica Industriale, con particolare riferimento ai contenuti dei corsi di Chimica Generale ed Inorganica, Chimica Organica I, Chimica Analitica I, Chimica Fisica I.

Conoscenze e abilità da acquisire :

I colloidi rappresentano un'ampia ed eterogenea classe di sistemi, dimensionalmente collocati tra il molecolare ed i sistemi macroscopici (colloidi tra 1 nm e 1 μ m, IUPAC), estremamente pervasiva e di elevata rilevanza non solo dal punto di vista strettamente chimico, ma anche tecnologico, ambientale e biologico.

Il corso vuole offrire un'introduzione alla chimica e dei colloidi e delle dispersioni colloidali, alla chimica di superficie e delle interfacce, contestualizzando quali siano le condizioni ed i parametri rilevanti nel definire la stabilità di una dispersione colloidale. Si prefigge inoltre di trattare i principali approcci sintetici ed analitici per la preparazione, l'eventuale funzionalizzazione e la caratterizzazione di un sistema colloidale.

Il corso è diviso in due parti.

In particolare, la prima parte del corso si focalizzerà sui modelli, sui criteri e le condizioni per definire la stabilità di una dispersione colloidale, evidenziando la complessa interazione di vari parametri chimico-fisici e sperimentali nel determinare tale stabilità. Verranno introdotti la terminologia e la classificazione relativa ai sistemi colloidali e successivamente descritti le principali teorie utilizzate nel descrivere la stabilità colloidale, la termodinamica e la cinetica delle sospensioni colloidali, le condizioni che portano alla destabilizzazione di una dispersione colloidale ed i fenomeni ad essa correlati (flocculazione, coagulazione, sedimentazione, Ostwald ripening, coalescenza, creaming). Particolare enfasi verrà data alla teoria DLVO a partire dalle interazioni (elettrostatiche e di van der

Waals) che ne costituiscono la base. Nella seconda parte del corso verranno invece affrontati aspetti legati alla sintesi, alla funzionalizzazione, alla caratterizzazione ed all'uso di dispersioni colloidali.

Il corso di prefigge quindi di fornire agli studenti gli strumenti metodologici e teorici per comprendere la natura e la stabilità di un sistema colloidale, nonché i possibili approcci a) sperimentali e sintetici per ottenere una dispersione colloidale ed b) analitici per caratterizzarla.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Didattica frontale.

Contenuti :

Parte A: Chimica, termodinamica e stabilità di sistemi colloidali

• I colloidali, la dimensione trascurata: introduzione storica ed evoluzione del concetto di colloide.

• Definizione, classificazione e natura delle dispersioni colloidali. Caratteristiche fisiche rilevanti di un colloide (forma, dimensione, aggregazione, polidispersione, concentrazione).

• Forze ed interazioni in sistemi colloidali. Chimica fisica e termodinamica di superficie e delle interfacce. Diffusione, moto browniano. Tensione superficiale, angolo di contatto. Stabilità cinetica e termodinamica delle dispersioni colloidali. Chimica di superficie e carica superficiale nei sistemi colloidali, IEP, potenziale zeta. Modelli del doppio strato elettrico. Equazione di Poisson-Boltzmann, approssimazione di Debye-Hückel, teoria Gouy-Chapman. Lunghezza di Debye e suo significato fisico. Ioni determinanti il potenziale, adsorbimento specifico di ioni. Interazioni di colloidali, effetto di elettroliti. Interazioni di van der Waals. Interazioni di vdW a livello macroscopico. Costante di Hamaker. Teoria Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek (DLVO). Meccanismi di aggregazione e destabilizzazione di una sospensione colloidale: flocculazione/ coagulazione, sedimentazione, Ostwald ripening, coalescenza. Concentrazione critica di coagulazione. Teoria della coagulazione (lenta e rapida). Rapporto di stabilità di Fuchs. Regola di Schulze-Hardy. Peptizzazione. Stabilizzazione sterica di colloidali e aspetti termodinamici. Temperatura critica di flocculazione.

• Molecole anfifiliche e tensioattivi (surfactants): definizione, natura, tipologie, sintesi, parametro HLB (Hydrophilic-lipophilic balance). Micelle, termodinamica di micellizzazione (critical micelle concentration, cmc). Colloidali di associazione (association colloids).

• Metodi per la modellizzazione della soft matter.

Parte B: sintesi, funzionalizzazione, caratterizzazione ed applicazioni

• Pervasività dei colloidali nella vita quotidiana e nell'industria.

• Strategie generali di sintesi di sistemi colloidali: metodi di dispersione, metodi di nucleazione/crescita. Emulsioni, microemulsioni, miniemulsioni: caratteristiche, peculiarità, approcci sintetici ed applicazioni.

• Ulteriori metodi di sintesi di colloidali (seeded growth, nucleazione da soluzione, metodi assistiti da laser, sonochimica ecc.)

• Strategie di funzionalizzazione di superfici di colloidali: individuazione dei gruppi funzionali ed approcci sintetici.

• Metodologie di caratterizzazione chimico-fisica di sospensioni colloidali e di solidi da esse isolati

o Diffusione statica e dinamica di radiazione (Static (SDS) and dynamic light scattering, DLS)

o Determinazione del potenziale zeta

o Viscosimetria, UV-Vis, turbidimetria

o Cenni di reologia

o Ultracentrifugazione analitica

o Caratterizzazione di particelle colloidali isolate da una sospensione

o Breve excursus su altre metodologie analitiche in ambito colloidale

• Ambiti di applicazioni dei colloidali: chimica degli alimenti, cosmetica, chimica ambientale, detergenza, catalisi, sensoristica,

Modalità di esame :

Prova orale.

Criteri di valutazione :

Lo studente dovrà dimostrare di aver acquisito le nozioni fondamentali fornite a lezione per comprendere la natura di una dispersione colloidale e prevederne la stabilità. In questo contesto, criteri di valutazione saranno il rigore quantitativo nelle dimostrazioni, la proprietà ed il rigore terminologico, il grado di approfondimento degli argomenti, la capacità di istituire nessi tra argomenti diversi trattati nel corso e di proporre, sulla base delle conoscenze acquisite a lezione, eventuali strategie per la preparazione e lo studio di una particolare dispersione colloidale.

Testi di riferimento :

CONTENUTO NON PRESENTE

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Appunti e presentazioni powerpoint di lezione, articoli e review indicati dal docente.

CHIMICA FISICA 1

(Titolare: Prof. ANTONINO POLIMENO)

Periodo: Il anno, 1 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 56A+30E; 10,00 CFU

Prerequisiti :

Istituzioni di matematiche. In particolare, è consigliata la conoscenza di elementi del calcolo differenziale.

Conoscenze e abilità da acquisire :

Il corso si propone di rendere chiari i principi, i metodi e le applicazioni della termodinamica dei sistemi all'equilibrio, ed i principi di cinetica chimica macroscopica.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni frontali e attività intense di esercitazioni

Contenuti :

• Grandezze di stato e funzioni di stato.

• Il Principio della Termodinamica: calore, lavoro, energia interna ed entalpia.

• Il Principio della Termodinamica: entropia, macchine termiche, energia libera, determinazione dell'entropia assoluta. Grandezze standard e proprietà differenziali delle funzioni di stato termodinamico.

• Proprietà termodinamiche di sostanze pure. Equilibri di fase di sostanze pure. Tensione superficiale e fenomeni di nucleazione.

• Soluzioni e miscele: grandezze parziali molari e potenziali chimici, equilibri di fase, modelli per le soluzioni.

- Soluzioni diluite e proprietà colligative.
- Equilibri di reazione: energia libera di reazione e costante di equilibrio.
- Soluzioni ioniche, equazione di Debye per i coefficienti di attività.
- Celle galvaniche e loro descrizione termodinamica; equazione di Nerst
- Descrizione macroscopica della cinetica chimica: velocità di reazione, legge cinetica, ordine di reazione.
- Meccanismi di reazione: processi unimolecolari e bimolecolari, ipotesi dello stato stazionario.
- Equazione di Arrhenius.
- Catalisi e meccanismo di Michaelis-Menten.

Modalità di esame :

Accertamenti periodici sotto forma di esercizi numerici applicati a sistemi termochimici e quesiti teorici.

Criteri di valutazione :

La valutazione sarà basata sul grado di comprensione delle metodologie dimostrato dallo/a studente/essa, e sulla capacità di applicarle a problematiche chimico-fisiche correnti.

Testi di riferimento :

P. Atkins, J. De Paula, *Physical Chemistry*. : Oxford University Press,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Dispense ed appunti di lezione.

CHIMICA FISICA 2

(Titolare: Prof. GIORGIO MORO)

Periodo: Il anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 64A+30E; 11,00 CFU

Prerequisiti :

Istituzioni di matematiche, Fisica generale I.

Conoscenze e abilità da acquisire :

Conoscenza dei fondamenti e dei metodi della Meccanica Quantistica.
 Conoscenza delle proprietà molecolari descritte secondo la Meccanica Quantistica.
 Capacità di calcolo di osservabili quantistiche in sistemi modello.
 Capacità di interpretazione di osservabili sperimentali in termini di proprietà molecolari.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni d'aula frontali con la presentazione e la discussione dei singoli capitoli del programma dell'insegnamento.
 Sessioni di esercitazioni con svolgimento di applicazioni e relativi calcoli numerici.
 Test periodici per l'autovalutazione da parte degli studenti del livello di acquisizione della materia del corso.

Contenuti :

I METODI DELLA MECCANICA QUANTISTICA:

Richiami di meccanica classica; deviazioni dal comportamento classico per i sistemi atomici e molecolari.
 Principi della meccanica quantistica: funzione d'onda, operatori e osservabili, valori di attesa di operatori, interpretazione probabilistica delle misure su sistemi quantistici.
 L'operatore Hamiltoniano, l'equazione di Schroedinger dipendente dal tempo e le sue soluzioni.
 Descrizione quantistica del moto traslazionale, rotazionale, vibrazionale in riferimento a sistemi modello.
 Operatori momento angolare, loro proprietà ed armoniche sferiche.
 Interazioni con la radiazione elettromagnetica e momenti di transizione.

STRUTTURA E PROPRIETA' DEGLI ATOMI:

Struttura dell'atomo di idrogeno e dei sistemi idrogenoidi.
 Lo spin dell'elettrone e dei nuclei e proprietà magnetiche.
 Atomi con più elettroni. Configurazione elettronica. Il principio di esclusione di Pauli e la simmetria della funzione d'onda di molti elettroni.
 Termini spettroscopici. Regole di selezione per le transizioni elettroniche nei sistemi atomici.

STRUTTURA E PROPRIETA' DELLE MOLECOLE:

Lo ione molecolare H₂⁺. La molecola di idrogeno.
 Molecole biatomiche. Molecole con più di due atomi.
 Metodi approssimati di soluzione dell'equazione di Schroedinger. Il metodo variazionale. Il metodo autoconsistente di Hartree-Fock.
 L'approssimazione di Hückel.
 Operazioni di simmetria molecolare, gruppi di simmetria e loro rappresentazioni, uso delle tabelle dei caratteri.

Modalità di esame :

Accertamenti scritti parziali durante lo svolgimento del corso. Accertamento scritto finale (per chi non avesse superato gli accertamenti scritti durante il corso). Esame orale conclusivo.

Criteri di valutazione :

Profondità e coerenza della conoscenza delle metodologie chimico-fisiche per la descrizione delle molecole e delle loro proprietà.
 Capacità di applicazione dei metodi chimico-fisici a casi specifici.

Testi di riferimento :

P. Atkins, J. de Paula, *Chimica Fisica*. Bologna: Zanichelli, 2012
 D. A. McQuarrie, J. D. Simon, *Chimica fisica - Un approccio molecolare*. Bologna: Zanichelli, 2000

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Le diapositive utilizzate dal docente durante il corso saranno messe a disposizione in formato elettronico.

CHIMICA FISICA 3

(Titolare: Prof.ssa MARILENA DI VALENTIN)

Periodo: III anno, annuale
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 40A+10E+72L; 12,00 CFU

Prerequisiti :

Fisica I e Fisica II, Chimica fisica I e Chimica fisica II

Conoscenze e abilità da acquisire :

Il corso si propone di integrare la preparazione chimico-fisica dello studente per quanto riguarda i principi di spettroscopia. Si fornirà una introduzione teorica sulle principali tecniche spettroscopiche di interesse chimico, corredata da esercitazioni pratiche.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Sono previsti: 5 CFU (40 ore) di lezione frontale, in cui si spiegheranno i modelli molecolari e le tecniche sperimentali che verranno utilizzati in laboratorio, 1 CFU di esercizi (10 ore) utilizzati per applicare i modelli a esempi specifici e 6 CFU di attività di laboratorio (72 ore) dove verranno effettuati gli esperimenti descritti in aula.

Contenuti :

Elementi generali di spettroscopia: caratteristiche della radiazione elettromagnetica; interazione radiazione-materia (assorbimento, emissione) e teoria fenomenologica di Einstein. Spettroscopia di assorbimento infrarosso (IR): conoscenza delle basi teoriche della spettroscopia IR, modi normali di vibrazione in molecole poliatomiche e momenti di dipolo di transizione. Introduzione alle tecniche spettroscopiche in trasformata di Fourier. Spettroscopia di assorbimento nel visibile e ultravioletto (UV-Vis): transizioni tra stati elettronici; cromofori; transizioni vibroniche, progressione di Franck-Condon. Interpretazione di spettri di assorbimento nell'UV-Vis. Spettroscopia di emissione di fluorescenza e fosforescenza: emissione radiativa e destino degli stati eccitati, fluorofori e loro proprietà. Spettri di emissione e di eccitazione di fluorescenza. Spettroscopia di Risonanza Magnetica Nucleare: osservabili spettroscopiche e descrizione dell'esperimento NMR a trasformata di Fourier.

Attività di laboratorio: a) Realizzazione di strumentazione ottica (polarimetro) e uso di strumentazione spettroscopica avanzata (spettrometro FT-IR, spettrofotometro UV-Vis, fluorimetro, spettrometro NMR); b) Applicazione di tecniche spettroscopiche per la misura di parametri molecolari, di grandezze relative a processi cinetici o di equilibrio attraverso l'elaborazione e l'interpretazione di spettri sperimentali.

Modalità di esame :

Esame scritto con esercizi inerenti alle spettroscopie ottiche e magnetiche e alle esperienze di laboratorio.

Esame orale per accertare le conoscenze acquisite.

Valutazione delle relazioni sulle esperienze di laboratorio.

Criteri di valutazione :

La valutazione dello studente si baserà su:

(i) competenze pratiche acquisite in laboratorio e la capacità di descrivere in maniera chiara e succinta il lavoro svolto nelle relazioni di laboratorio;

(ii) verifica, attraverso l'esame scritto e orale, del grado di comprensione e capacità di elaborazione indipendente degli argomenti svolti a lezione e approfonditi in laboratorio.

Testi di riferimento :

P. W. Atkins e Julio de Paula, Chimica Fisica. : Zanichelli,

P. W. Atkins e Julio de Paula, Physical Chemistry. : Oxford University Press,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Dispense di laboratorio.

Appunti di lezione.

Eventuali approfondimenti:

-P. W. Atkins, R. S. Friedman, Meccanica quantistica molecolare, prima ed. italiana (trad. terza edizione inglese), Zanichelli;

-R.J. Silbey, R.A. Alberty and M.G. Bawendi,

Physical chemistry (fourth edition), Wiley.

CHIMICA GENERALE E INORGANICA

(Titolare: Prof. MAURO SAMBI)

Periodo: I anno, annuale
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 64A+30E+24L; 13,00 CFU

Prerequisiti :

Nessuno

Conoscenze e abilità da acquisire :

Le lezioni in aula sono intese a fornire una prima alfabetizzazione chimica rigorosa agli studenti che si accingono allo studio della disciplina. La parte di esercitazioni prevede l'acquisizione degli elementi di base della stechiometria, cioè degli aspetti numerici dei più semplici concetti chimici. Le esperienze di laboratorio consentono l'acquisizione di conoscenze relative alle norme di prevenzione e sicurezza nell'uso di sostanze chimiche e alle norme comportamentali e di pronto intervento in caso di incidenti, nonché la familiarizzazione con vetreria ed altre semplici apparecchiature e con le procedure di uso più comune nei laboratori chimici.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni in aula; esercitazioni numeriche in aula; esercitazioni di laboratorio.

Contenuti :

LEZIONI AULA: Il metodo scientifico. Stati di aggregazione della materia. Miscele (omogenee, eterogenee) e sostanze pure. Elementi e composti; atomi e molecole. Teoria atomistica. Il numero atomico ed il numero di massa. Isotopi. Unità di massa atomica. Massa atomica relativa. Mole. Percentuali in massa, formula minima, formula molecolare. Numeri di ossidazione e loro determinazione. Bilanciamento chimico in forma molecolare/ionica. Bilancio massa/carica. Bilanciamento di reazioni non-redox, e redox con i metodi dei numeri di ossidazione e delle semireazioni.

Il legame chimico I: covalente, ionico e metallico. Strutture di Lewis. Metodo VSEPR.

Struttura dell'atomo secondo la meccanica quantistica. Atomo di Bohr e suoi limiti. Principio di indeterminazione di Heisenberg. Dualità onda-particella. Funzione d'onda. Equazione di Schrödinger e sue soluzioni per l'atomo monoelettronico. Orbitali atomici. Spin dell'elettrone. Introduzione agli atomi polielettronici. Modello a gusci dell'atomo. Principio dell'Aufbau. Principio di esclusione di Pauli. Regola di Hund.

Proprietà periodiche: raggio atomico e ionico, energia di ionizzazione, affinità elettronica, elettronegatività. Stechiometria degli idruri e degli ossidi binari. Proprietà acido/base degli ossidi.

Il legame chimico II. Teoria LCAO-MO per molecole biatomiche omonucleari ed eteronucleari.

Confronto alla teoria VB e confronto con la teoria MO. Gli orbitali ibridi del carbonio.

Legge del gas perfetto. Legge di Dalton. Teoria cinetica dei gas. Distribuzione di Maxwell-Boltzmann delle velocità molecolari. Effusione. Gas reali. Equazione di Van der Waals. Interazioni intermolecolari. Struttura dei solidi.

Equilibrio chimico. Legge di azione di massa. Principio di Le Chatelier. Termodinamica chimica. Prima e seconda legge della termodinamica. Legge di Hess. Energia libera di Gibbs. Criteri di spontaneità di una reazione chimica. Relazione tra costante di equilibrio e ΔG° .

Equilibri in soluzione. Elettroliti forti e deboli. Acidi e basi di Arrhenius, Brønsted-Lowry, Lewis. Idrolisi dei sali. Soluzioni tampone. Sali poco solubili.

Introduzione ai diagrammi di fase p, T per un componente. Regola delle fasi. Diagrammi di fase per miscele a due componenti volatili.

Legge di Raoult. Distillazione. Miscele azeotropiche. Proprietà colligative.

Elettrochimica. Potenziali standard di riduzione. Equazione di Nernst. Le pile. Corrosione e protezione dalla corrosione. L'elettrolisi.

Leggi di Faraday. La sovratensione.

Cinetica chimica. La velocità e l'ordine di reazione. Tempo di dimezzamento. Energia di attivazione. Equazione di Arrhenius. Meccanismi di reazione. Processi elementari. Rate-determining step. Catalizzatori.

ESERCITAZIONI NUMERICHE IN AULA: esercizi e dimostrazioni su argomenti trattati nelle lezioni d'aula, con le quali sono strettamente coordinate.

ESERCITAZIONI DI LABORATORIO: (1) Caratteristiche di alcuni processi chimici e fisici (reazioni acido/base, salificazione, processi endo/esotermici); (2) Esperimenti di elettrochimica (reazioni redox, pila Daniell, elettrolisi dell'acqua); (3) Equilibrio chimico (effetto della concentrazione, della temperatura e dello ione comune) (4) Titolazioni acido-base (titolazioni forte/forte e debole/forte); (5) Distillazione di una soluzione acquosa di acido cloridrico; (6) Ciclo del rame (reazioni redox, acido/base, di precipitazione applicate alla chimica acquosa del rame).

Modalità di esame :

Relazioni di laboratorio, prova scritta di stechiometria e prova orale.

Criteri di valutazione :

Costituiscono elementi di valutazione della prova scritta la correttezza dei risultati numerici, l'esplicitazione dei procedimenti attuati per ottenerli, la coerenza interna tra risultati logicamente interdipendenti e il rigore nell'utilizzo corretto delle unità di misura associate alle grandezze fisiche utilizzate. Il superamento di questa dà accesso all'esame orale, dove vengono valutate le competenze acquisite dallo studente nella parte teorica del corso. Criteri di valutazione della prova orale sono il rigore quantitativo nelle dimostrazioni, il grado di approfondimento degli argomenti, la capacità di istituire nessi tra aspetti diversi di un fenomeno chimico. L'acquisizione dei contenuti delle esperienze di laboratorio viene valutata sulla base di relazioni scritte compilate rispettando una griglia predeterminata di quesiti. Saranno considerati come criteri di valutazione la correttezza, la completezza, la concisione e la proprietà di espressione nella stesura delle relazioni.

Testi di riferimento :

D. W. Oxtoby, H. P. Gillis, A. Campion, *Principles of Modern Chemistry*. : Ed. Brooks/Cole, Cengage Learning,

S. S. Zumdahl, *Chemical Principles*. : Ed. Brooks/Cole, Cengage Learning,

P. Michelin Lausarot , G. A. Vaglio, *Fondamenti di stechiometria*. : Piccin,

P. Ferri, *Calcoli stechiometrici*. : ETS,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Appunti di lezione, materiale scaricabile dal sito web del docente:

<http://www.chimica.unipd.it/mauro.sambi/pubblica/didattica.html>

CHIMICA INORGANICA 1

(Titolare: Prof. ANDREA BIFFIS)

Periodo: Il anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 56A+10E+24L; 10,00 CFU

Prerequisiti :

Aver superato l'esame di Chimica Generale

Conoscenze e abilità da acquisire :

Si intende dare una visione completa della chimica degli elementi dei gruppi principali e dei loro composti, in particolare per quel che concerne la preparazione, le proprietà principali, la reattività (specialmente in soluzione) e le applicazioni. Verranno inoltre evidenziati gli andamenti periodici che caratterizzano la chimica di questi elementi.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Il corso prevede 56 ore di aula i cui contenuti vengono illustrati prevalentemente con schemi alla lavagna, supportati da diapositive. I ritmi della lezione sono pensati in modo da garantire agli studenti una comprensione diretta degli argomenti trattati e la stesura di appunti dettagliati.

Le 10 ore di esercitazione servono a presentare, illustrare in dettaglio e discutere le attività di laboratorio, come pure a ritornare su alcuni aspetti pratici degli argomenti trattati nelle lezioni d'aula.

La parte di laboratorio prevede di effettuare esperienze di sintesi e caratterizzazione di alcuni composti inorganici chiave di elementi dei gruppi principali. Le esperienze vengono effettuate in gruppi da 2-3 persone. Al termine del laboratorio, gli studenti stilano relazioni di laboratorio individuali.

Contenuti :

LEZIONI IN AULA

1) Fondamenti di Chimica Inorganica

Orbitali in atomi mono- e polielettronici. Effetto di schermo orbitale di Slater. Aufbau e costruzione della tavola periodica. Proprietà periodiche.

Il legame chimico. Il legame ionico nelle coppie ioniche e nei solidi ionici. Il legame covalente: teoria di Lewis, teoria VB ed MO.

Molecole biatomiche omo- ed eteronucleari. Molecole poliatomiche: relazione tra geometria e struttura elettronica (metodo LGO). Il

legame metallico: elementi di teoria delle bande. Il legame ionico: solidi ionici ed energia reticolare. Il legame coordinativo: teoria HSAB, acquazioni.

2) Sistematica degli elementi dei gruppi principali

La chimica degli elementi dei gruppi 1,2,13,14,15,16,17,18 sarà trattata per gruppo. Particolare risalto verrà dato alle proprietà periodiche degli elementi, alle variazioni di proprietà all'interno di un gruppo e tra elementi contigui, alla preparazione e reattività degli elementi e dei composti più comuni (ad es. idruri, ossidi, alogenuri, composti elemento-organici). L'importanza economica e le principali applicazioni tecnologiche degli elementi e composti verranno altresì sottolineate.

LEZIONI IN LABORATORIO

Le esercitazioni in aula illustrano le tecniche più usate in un Laboratorio di Chimica Inorganica e danno una descrizione dettagliata delle Esperienze di Laboratorio. Le Esperienze di Laboratorio intendono verificare sperimentalmente alcuni concetti e fenomeni illustrati nelle lezioni d'aula ed applicarli alla sintesi e caratterizzazione di composti inorganici. Le attività vertono su classiche reazioni quali: dissoluzione e precipitazione di composti poco solubili (sali, ossidi, idrossidi); ossido-riduzioni, formazione di complessi.

Modalità di esame :

Esame orale relativo ai contenuti del corso (aula e laboratorio), con test di accesso scritto e valutazione delle relazioni di laboratorio.

Criteri di valutazione :

Le relazioni di laboratorio vengono valutate tenendo in considerazione i seguenti criteri:

- capacità di presentare, organizzare e discutere criticamente le informazioni;
- uso appropriato della terminologia chimica;;
- capacità di collegamento fra risultati sperimentali e nozioni teoriche.

L'esame orale e il test di accesso vengono valutati secondo i seguenti criteri:

- aderenza delle risposte alle domande proposte;
- distinzione tra proprietà generali di un elemento o gruppo di elementi e nozioni di dettaglio;
- uso appropriato della terminologia chimica;
- capacità e prontezza nella scrittura delle equazioni chimiche bilanciate;
- confronto critico fra caratteristiche dei diversi elementi e collegamento con la posizione dell'elemento nella tavola periodica.

Testi di riferimento :

P. Atkins, T. Overton, J. Rourke, M. Weller, F. Armstrong, Chimica inorganica. : Zanichelli,

C.E. Housecroft, A.G. Sharpe, Inorganic Chemistry. : Pearson-Prentice Hall,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Appunti di lezione

Diapositive di lezione (PowerPoint)

Dispense di laboratorio

Testi di riferimento

CHIMICA INORGANICA 2

(Titolare: Prof. MARCO ZECCA)

Periodo:

III anno, annuale

Indirizzo formativo:

Corsi comuni

Tipologie didattiche:

40A+10E+48L; 10,00 CFU

Prerequisiti :

Chimica Inorganica 1

Conoscenze e abilità da acquisire :

Si intende dare una visione completa delle proprietà degli elementi del blocco d (gruppi 3-12) e introdurre alcune basi concettuali per la loro interpretazione. Nella parte di laboratorio gli studenti familiarizzeranno con alcune operazioni e tecniche tipiche del laboratorio inorganico e potranno verificare sperimentalmente alcuni concetti e fenomeni illustrati nella parte teorica. Per quanto riguarda le analisi strumentali il laboratorio prevede la raccolta e interpretazione di spettri FT-IR (medio e basso IR), di spettri elettronici in soluzione (UV-Vis), la caratterizzazione mediante GC-MS e misure di magnetismo di composti dei metalli di transizione.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Il corso consiste in una parte teorica, dedicata ad alcuni argomenti generali e alla chimica descrittiva degli elementi dei gruppi 3-12, e in una parte di laboratorio. La parte teorica sarà sviluppata attraverso lezioni frontali (40 ore, in italiano), anche mediante l'uso di proiezione di diapositive. La parte di laboratorio sarà sviluppata attraverso lezioni frontali introduttive e di commento (10 ore, in italiano), comprendenti anche la formazione specifica sulla sicurezza, e attività pratica svolta dagli studenti (48 ore). Per motivi organizzativi l'attività pratica non sarà svolta individualmente, ma a gruppi di due o tre studenti (a seconda della numerosità degli iscritti). Al termine della pratica di laboratorio ogni studente dovrà redigere due relazioni individuali su altrettanti esperimenti del programma di laboratorio.

Contenuti :

Il blocco d e le serie di transizione, configurazioni elettroniche. Struttura dei metalli in stato solido: modello a sfere rigide, reticoli compatti, cenni di teoria delle bande. Proprietà fisiche, chimico-fisiche e chimiche degli elementi del blocco d e loro variazione lungo le serie e nei gruppi.

Tipi di leganti, modi di coordinazione, nomenclatura e scrittura di formule dei complessi. Numeri di coordinazione e geometrie ricorrenti per i numeri di coordinazione da 2 a 6. Il modello di Kepert. Isomeria nei composti di coordinazione.

Teoria del campo cristallino: simmetria degli orbitali d, separazione degli orbitali atomici in campo ottaedrico e tetraedrico, dipendenza della forza del campo cristallino dalla carica dello ione centrale, dal periodo di appartenenza dell'elemento e dalla natura dei leganti

(serie spettrochimica). Complessi ad alto spin e a basso spin. L'energia di stabilizzazione del campo cristallino e sua variazione con la configurazione elettronica dello ione metallico. Previsione delle distorsioni tetragonali della struttura ottaedrica, il campo quadrato-planare.

â€¢ Teoria dell'orbitale molecolare: complessi ottaedrici sigma, complessi pi-greco. Leganti pi-greco-basici e pi-greco-acidi. Interpretazione della serie spettrochimica e della regola dei 18 elettroni.

â€¢ Spettroscopia elettronica dei complessi: spettri elettronici, bande di trasferimento di carica, bande d-d, le regole di selezione, valori tipici di λ_{max} . Repulsioni elettroniche, termini atomici, regole di Hund, termini spettroscopici per i complessi ad alto spin, diagrammi di Orgel e di Tanabe-Sugano. Il parametro B di Racah, effetto nefelauxetico, la teoria del campo dei leganti.

â€¢ Paramagnetismo e diamagnetismo, l'ipotesi di solo spin, suscettivit  magnetica e sua relazione con il momento magnetico. Ferro- e ferrimagnetismo, antiferromagnetismo.

â€¢ Effetto dell'energia di stabilizzazione del campo cristallino su alcune propriet  termodinamiche di composti dei metalli della prima serie di transizione: energie reticolari dei di e trialogenuri, entalpia standard di idratazione degli ioni divalenti, struttura degli spinelli.

â€¢ Costanti termodinamiche di formazione parziali e globali dei complessi: l'effetto chelato; la serie di Irving-Williams.

â€¢ Reazioni di sostituzione nei complessi ottaedrici: tipi di meccanismo e criteri per individuarli; l'energia di attivazione del campo cristallino e inerzia cinetica.

â€¢ Chimica descrittiva degli elementi di transizione: diffusione in natura e metodi di estrazione degli elementi. Comportamento chimico degli elementi della prima serie di transizione e di alcuni della seconda e terza serie di transizione: classi di composti principali (ossidi, alogenuri), chimica acquosa e di coordinazione.

â€¢ Laboratorio: Descrizione dei rischi specifici dell'attivit  sperimentale prevista per il corso, delle relative misure di prevenzione del rischio e delle regole di buona tecnica; test sulla sicurezza; introduzione alle esperienze di laboratorio; discussione dei risultati delle esperienze di laboratorio. Esperimenti: sintesi e purificazione di complessi di metalli di transizione; nitratura di cromo acetilacetato; spettroscopia elettronica e misura di λ_{max} e B mediante i diagrammi di Tanabe-Sugano; isomeria di legame nei complessi di cobalto(III) e geometrica nei complessi di rame(II); velocit  di idrolisi di pentaamminoclorocobalto(III); chimica ossidoriduttiva acquosa del vanadio.

Modalit  di esame :

L'esame prevede un test scritto preliminare e un successivo colloquio orale, che riguarda sia gli argomenti teorici delle lezioni in aula che gli argomenti di laboratorio. Non   consentito sostenere separatamente un colloquio sulla parte teorica e uno sulla parte laboratorio. Per essere ammessi al colloquio   necessario:

- 1) aver frequentato tutte le ore di laboratorio e del 75% delle relative lezioni (firme di presenza richieste); la frequenza del laboratorio   consentita solo se si   stati presenti alle lezioni sulla sicurezza si   superato il relativo test;
- 2) Aver consegnato nei termini e nelle modalit  stabilite le relazioni scritte sugli esperimenti di laboratorio;
- 3) aver ottenuto un risultato positivo nel test preliminare.

Se per qualunque motivo i precedenti requisiti relativi al laboratorio non vengono raggiunti, esso andr  frequentato nel successivo anno accademico (non sono previsti turni di recupero).

Nel caso in cui l'esame non venga superato anche il test scritto preliminare dovr  essere ripetuto.

Criteri di valutazione :

Il profitto dello studente viene valutato sulla base di due elementi:

le relazioni scritte di laboratorio;
il colloquio orale.

Il colloquio riguarda sia la parte teorica generale (compresa la chimica descrittiva) che quella di laboratorio (completa e non limitata agli esperimenti trattati delle relazioni).

Nel caso in cui si accerti che le relazioni sono state copiate o tradotte, non verranno valutate e il laboratorio dovr  essere nuovamente frequentato l'anno successivo (non son previsti turni di recupero).

Gli elementi considerati nella valutazione delle relazioni sono i seguenti:

- 1) rispetto delle linee guida;
- 2) rispetto dei termini di consegna;
- 3) capacit  di selezionare le informazioni importanti ed essenziali;
- 4) ordine e coerenza nella trattazione degli argomenti;
- 5) uso appropriato del linguaggio tecnico, delle grandezze, delle cifre significative, delle unit  di misura;
- 6) propriet  dei concetti teorici utilizzati;
- 7) capacit  di collegamento fra risultati sperimentali e teoria;
- 8) capacit  di elaborazione autonoma rispetto alle indicazioni ricevute dai docenti tramite, lezioni e dispense, e dalla letteratura (libri di testo, pubblicazioni scientifiche e tecniche).
- 9) propriet  della lingua italiana.

Gli elementi considerati nella valutazione del colloquio orale sono i seguenti:

- 1) capacit  e prontezza di inquadramento degli argomenti in discussione;
- 2) capacit  di sviluppare gli argomenti in discussione in modo autonomo;
- 3) sicurezza nell'esposizione;
- 4) livello di dettaglio raggiunto nell'illustrazione degli argomenti in discussione;
- 5) capacit  di collegamento logico fra concetti e argomenti diversi, anche secondo schemi non necessariamente messi in evidenza durante le lezioni;
- 6) uso di linguaggio appropriato.

Testi di riferimento :

C.E. Housecroft, A.G. Sharpe, *Inorganic Chemistry*. : Pearson-Prentice Hall,
P. Atkins, T. Overton, J. Rourke, M. Weller, F. Armstrong, *Chimica Inorganica*. : Zanichelli,
N. N. Greenwood, A. Earnshaw, *Chemistry of the Elements*. : Butterworth-Heinemann (Elsevier),
Francesco Neve, *Chimica di coordinazione-Dalla teoria alla pratica*. Padova: Piccin,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Diapositive delle lezioni (parte teorica generale, esclusa la chimica descrittiva; in italiano).

Dispense di laboratorio (informazioni sulla sicurezza e procedure sperimentali).

Linee-guida per la redazione delle relazioni di laboratorio.

Il materiale didattico   disponibile nella piattaforma di e-learning del Dipartimento di Scienze Chimiche (richiesta autenticazione con le

CHIMICA ORGANICA 1

(Titolare: Prof.ssa GIULIA MARINA LICINI)

Periodo: I anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 72A+10E; 10,00 CFU

Prerequisiti :

Conoscenza della Tavola Periodica degli Elementi e del suo significato; conoscenza di base sulla termodinamica e cinetica che regolano un processo chimico. legame chimico e strutture di Lewis; teoria del VB e MO; orbitali ibridi del carbonio

Conoscenze e abilità da acquisire :

Al termine del corso gli studenti dovranno:

(1) aver compreso gli aspetti generali più importanti che sono alla base della chimica dei composti organici (atomi che interessano la chimica organica e loro struttura elettronica, legami e struttura delle molecole, nomenclatura, interazioni acido-base, interazioni nucleofilo-elettrofilo, concetti di base che riguardano i meccanismi delle reazioni organiche, stereochimica)

(2) aver capito i principi che governano la reattività e le proprietà delle più comuni classi di composti organici monofunzionali.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

il corso prevede lezioni frontali ed esercitazioni in aula. Saranno inoltre svolti test di autovalutazione al termine degli argomenti e simulazioni in classe del compito finale.

Contenuti :

Strutture atomiche e molecolari;

Nomenclatura. Regole base per denominare composti organici semplici: alcani, cicloalcani, alogenuri, nitroalcani, eteri, alcheni, alchini, composti aromatici.

Geometrie tridimensionali, interazioni intermolecolari, proprietà fisiche

Orbitali molecolari 1. Ibridizzazione, orbitali molecolari a due centri

Stereochimica. Simmetria, Chiralità e stereogenicità. Descrittori di configurazione assoluta e relativa.

Reazioni di trasferimento protonico. Introduzione ai meccanismi di reazione.

I processi elementari. Teoria dell'orbitale molecolare e reazioni chimiche.

Nomenclatura dei gruppi funzionali principali: alcoli, amine, chetoni, aldeidi, acidi carbossilici e derivati.

Reazioni a più passaggi: SN1 e E1.

Reazioni di sostituzione nucleofila e eliminazioni Competizione tra SN2, SN1, E2, and E1. Reazioni utili in sintesi organica.

Addizione elettrofila a legami non polari: addizione di acidi di Brønsted, reazioni che coinvolgono stati di transizione ciclici. Reazioni radicaliche. Concetti di basi di sintesi organica. Sistemi estesi, coniugazione e aromaticità.

Modalità di esame :

L'esame di chimica organica 1 consiste in una prova scritta costituita da domande a risposta multipla e/o a risposta aperta, eventualmente integrati da colloqui orali. Durante il corso potranno essere effettuate delle prove di accertamento in itinere

Criteri di valutazione :

La valutazione della preparazione dello studente si baserà sulla comprensione degli argomenti svolti, sull'acquisizione dei concetti proposti e sulla capacità di applicarli alla sintesi di strutture molecolari organiche monofunzionali.

Testi di riferimento :

Joel Karty, Organic Chemistry: Principles and Mechanisms. New York USA: W. W. Norton & Company Inc, 2014

Clayden, Greeves, Warren, Organic Chemistry, Second Edition. Oxford: Oxford University Press, 2012

Paula Y. Bruice, Organic Chemistry / Edition 7. : Prentice Hall, 2013

P. Y. Bruice, Chimica Organica con Modelli Molecolari. : EDI, 2012

D. E. Klein, Organic Chemistry, 3rd Edition. : , 2017

D.E. Klein, Organic Chemistry, 2nd Edition. : , 2014

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Dispense del docente e-learning (MOODLE DISC) <http://www.chimica.unipd.it>

CHIMICA ORGANICA 2

(Titolare: Prof. FERNANDO FORMAGGIO)

Periodo: Il anno, 1 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 48A+10E+48L; 11,00 CFU

Prerequisiti :

Conoscenza dei fondamenti forniti dal corso di Chimica Organica I

Conoscenze e abilità da acquisire :

Completamento della preparazione di base fornita dal corso di Chimica Organica I circa le caratteristiche e le proprietà dei composti organici monofunzionali. Le conoscenze vengono acquisite attraverso lo studio delle principali classi di reazioni dei composti organici.

Saranno anche fornite nozioni di base su alcune molecole organiche polifunzionali (fosfolipidi, amminoacidi, carboidrati e nucleotidi), utili per affrontare lo studio della Chimica Biologica (II semestre).

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Sono previste lezioni frontali per 48 ore e 48 ore di esercitazioni di laboratorio. Nelle lezioni in aula si privilegerà l'uso della lavagna. Saranno comunque forniti agli studenti tutti i file elettronici proiettati durante le lezioni.

Contenuti :

Aromaticità, sostituzioni elettrofile aromatiche, effetti di attivazione e orientamento.

Reazioni di sostituzione nucleofila aromatica. Reazioni degli acidi carbossilici.

Derivati degli acidi carbossilici e loro reazioni.

Reattività di aldeidi e chetoni.

Cenni sulla chimica organica di carboidrati, lipidi, amminoacidi, proteine ed acidi nucleici.

Laboratorio di chimica organica.

- Norme di sicurezza nei laboratori chimici e uso di apparecchiature di laboratorio.

- Sintesi di composti organici.

- Tecniche separative e di caratterizzazione: cristallizzazione e determinazione del punto di fusione; tecniche di estrazione di composti organici, estrazione di sostanze acide e basiche; separazioni cromatografiche; scelta dell'eluente, cromatografia su strato sottile e su colonna.

Verranno inoltre svolte esercitazioni teoriche in supporto al corso di Chimica Organica 2

Modalità di esame :

Durante lo svolgimento del corso sono effettuati accertamenti periodici mediante compiti scritti con domande a scelta multipla e a risposta aperta. Saranno incluse anche domande su quanto svolto nel corso parallelo di laboratorio. In carenza o insufficienza degli accertamenti periodici lo studente dovrà sostenere un esame finale in forma orale.

Criteri di valutazione :

Sarà valutata la capacità di riconoscere e distinguere le diverse classi di composti organici e di derivarne le proprietà chimico-fisiche analizzando la loro struttura chimica.

Testi di riferimento :

Klein D. R., Organic Chemistry. : Wiley, 2017

Bruice P. Y., Chimica Organica. Napoli: EdiSES, 2012

CHIMICA ORGANICA 3

(Titolare: Prof. PAOLO SCRIMIN)

Periodo: III anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 56A+10E+48L; 12,00 CFU

Prerequisiti :

Chimica organica 1, Chimica organica 2.

Conoscenze e abilità da acquisire :

Il corso completa la preparazione di base in chimica organica ed introduce elementi per la caratterizzazione strutturale di composti organici attraverso analisi spettroscopiche (NMR e massa).

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni frontali svolte con l'ausilio della proiezione di diapositive.

Laboratorio: esercitazione di caratterizzazione di un composto incognito mediante separazione cromatografica e acquisizione ed analisi degli spettri 1H-NMR e di massa.

Contenuti :

Parte 1: metodi fisici in chimica organica.

Risonanza Magnetica Nucleare (NMR): cenni su principi e metodi della tecnica. NMR protonico: equivalenza chimica e spostamento chimico; accoppiamento scalare; sistemi di spin; equivalenza magnetica; esercizi di analisi di spettri del primo ordine;

disaccoppiamento. NMR del carbonio-13: analisi di spettri NMR-C-13 ottenuti con disaccoppiamento protonico a banda larga.

Spettrometria di massa (MS): cenni su principi e strumentazione per ionizzazione elettronica; isotopi; frammentazione; ione molecolare e picco base; reazioni di frammentazione caratteristiche delle principali classi di composti organici. Esercizi di analisi di spettri.

Parte 2: chimica organica.

Chimica acido-base dei composti carbonilici; effetti induttivi e di risonanza; tautomeria cheto-enolica; enoli ed enolati; alfa alogenazione di composti carbonilici e reazione alformica; reazioni di addizione nucleofila di enolati a composti carbonilici e condensazione (reazione aldolica, reazione di Claisen); sintesi di composti carbonilici alfa,beta-insaturi; addizioni nucleofile 1,2 e 1,4; addizione di Michael; anellazione di Robinson; decarbossilazione. Reazioni di riduzione ed ossidazione. Cenni su composti eterociclici. Reazioni pericicliche.

Modalità di esame :

Esame scritto.

Criteri di valutazione :

Conoscenza degli argomenti del corso: livello di comprensione e di approfondimento; chiarezza e proprietà di elaborazione. Capacità di applicare i concetti acquisiti nella risoluzione di problemi.

Testi di riferimento :

R. M. Silverstein, F. X. Webster, Identificazione spettroscopica dei composti organici. ; ,

J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, P. Wothers, Organic Chemistry. ; ,

Bruice, Chimica Organica. ; ,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Sulla pagina web del docente sarà disponibile tutto il materiale didattico presentato a lezione (teoria ed esercizi).

CHIMICA ORGANICA INDUSTRIALE

(Titolare: Prof. STEFANO MAMMI) - Mutuato da: Laurea magistrale in Chimica Industriale (Ord. 2015)

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU

Prerequisiti :

Nessuno

Conoscenze e abilita' da acquisire :

Il corso intende descrivere lâ€™utilizzo e la produzione di composti organici da parte di alcuni settori industriali; alcuni di questi composti saranno oggetto delle esercitazioni di laboratorio. Sono inoltre trattati aspetti di ricerca industriale.

Attivit  di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni d'aula ed esercitazioni di laboratorio.

Contenuti :

Lezioni d'aula

- Detergenti: Classificazione dei tensioattivi. Meccanismo della detersione. Storia dei saponi e dei detergenti. Produzione di sapone.

Formulazione di vari tipi di sapone. Disinfettanti ed antisettici.

- Coloranti: Coloranti naturali e sintetici. Storia. Classificazioni e definizioni. Il "Colour Index". Aspetti economici. Ambiente, ecologia e tossicologia. Produzione. Metodi di applicazione e solidit  dei coloranti. Fibre naturali (animali e vegetali), semisintetiche e sintetiche.

- Composti organici per l'agricoltura: Insetticidi (inorganici, naturali, clorurati, organofosforici, carbammati). Altri metodi di IPM. Erbicidi. Regolatori di crescita delle piante.

- Produzione della carta: Metodi meccanici e chimici. Processo Kraft. Processi di sbianca. Disinchiostrazione e riciclo.

- Lavorazione delle pelli: Descrizione dei processi usati per ottenere cuoio da pelli grezze.

Quanto descritto sopra copre 5 CFU che sono mutuati dalla Laurea in Chimica. Per l'insegnamento mutuato   previsto un ulteriore CFU specifico che copre i seguenti argomenti:

- Adesivi

- Esplosivi

Attivit  di laboratorio (solo per la LM in Chimica Industriale):

- Sintesi del biodiesel da olio esausto.

- Riduzione enantioselettiva di un beta-chetoestere con lievito di birra.

- Utilizzo di coloranti per tessuti.

- Saponificazione di grassi alimentari.

- Preparazione di sciroppi ad alto contenuto di fruttosio (HFCS) e di bioetanolo da amido di mais.

- Flottazione di ioni.

Modalita' di esame :

L esame comprender  una prova orale che verter  sugli argomenti trattati sia in aula che in laboratorio. Andr  a comporre il voto finale anche la valutazione dell'attivit  svolta in laboratorio (risultati analitici e relazioni sugli esperimenti).

Per gli studenti della Laurea in Chimica l'esame consister  in una prova orale.

Criteri di valutazione :

Sar  valutata l'acquisizione delle conoscenze e delle abilit  pi  sopra descritte.

Testi di riferimento :

Ullman, Encyclopedia of Industrial Chemistry. : Wiley-VCH, 1998

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Dispense ed appunti di lezione.

Testi di consultazione: "Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry", 6th Edn., Wiley-VCH, 1998 - Electronic Release (Disponibile online al sito (<http://www.cab.unipd.it/> alla voce "banche dati"))

FISICA GENERALE 1

(Titolare: Prof. PIER LUIGI SILVESTRELLI)

Periodo: 1 anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 40A+10E; 6,00 CFU

Prerequisiti :

Istituzioni di matematiche.

Conoscenze e abilita' da acquisire :

Il corso   finalizzato all'acquisizione delle conoscenze di base di Meccanica nonch  al raggiungimento della capacit  di risolvere quantitativamente esercizi sugli stessi argomenti.

Contenuti :

Grandezze fisiche e unit  di misura. Elementi di calcolo vettoriale. Cinematica del punto: velocit  ed accelerazione; moto rettilineo; moto nel piano e nello spazio; caduta libera dei gravi; moto circolare; cenni ai moti relativi. Dinamica del punto: principio di inerzia e concetto di forza; le leggi di Newton; equilibrio statico e reazioni vincolari; forza peso, forze elastiche e moto armonico, forze di attrito; piano inclinato; pendolo semplice. Lavoro ed energia: lavoro di una forza, potenza, teorema delle forze vive ed energia cinetica; forze conservative, energia potenziale e conservazione dell'energia meccanica. Momenti angolari, forze centrali, la forza gravitazionale.

Dinamica dei sistemi di punti materiali: forze esterne ed interne, centro di massa, teorema del centro di massa, quantit  di moto; momento delle forze, teorema del momento angolare; sistema di riferimento del centro di massa e sue propriet ; urti. Dinamica del corpo rigido: rotazioni attorno ad un asse fisso, momenti di inerzia. Meccanica dei fluidi: pressione, equilibrio statico, legge di Stevino, principio di Archimede; regime stazionario, fluidi ideali, legge della portata; teorema di Bernoulli.

Modalita' di esame :

Prova scritta che prevede la soluzione di esercizi di Meccanica e successiva prova orale sui contenuti del Corso elencati nel programma. Il superamento delle prove scritte durante il corso equivale al superamento della prova scritta d'esame. La prova orale potr  essere sostituita da un questionario scritto.

Criteri di valutazione :

Verifica dell'acquisizione delle conoscenze teoriche di base e della capacit  di risolvere quantitativamente esercizi di applicazione.

Testi di riferimento :

P. Mazzoldi, M. Nigro, C. Voci, Elementi di Fisica (Meccanica-Termodinamica). : EdiSES, 2007

FISICA GENERALE 2

(Titolare: Prof. MARCO BAIESI)

Periodo: Il anno, 1 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 40A+10E; 6,00 CFU

Prerequisiti :

Istituzioni di matematiche. Fisica Generale I.

Conoscenze e abilità da acquisire :

Conoscenza delle nozioni fondamentali di elettromagnetismo ed ottica, e loro applicazione attraverso la soluzione di esercizi tipici.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni frontali 40 h

Esercizi svolti 10 h

Contenuti :

Elettricità, cariche e correnti elettriche. Legge di Coulomb. Campo elettrico. Potenziale elettrico di una carica e di una distribuzione di cariche. Dipolo elettrico. Induzione elettrostatica. Conduttori, isolanti. Teorema di Gauss. Condensatori. Dielettrici. Correnti elettriche. Legge di Ohm. Legge di Joule. Circuiti RC. Magnetismo. Campo magnetico. Legge di Biot e Savart. Forza di Lorentz. Spira percorsa da corrente. Momento di dipolo magnetico. Dipolo magnetico in campo magnetico. Teorema di Ampere. Elettromagnetismo. Legge di Faraday. Induttanza. Proprietà magnetiche della materia: paramagnetismo, diamagnetismo, ferromagnetismo. Campi elettromagnetici indotti. La corrente di spostamento. Equazioni generali di Maxwell per l'elettromagnetismo. Onde ed Ottica. Onde meccaniche: concetto di campo ondulatorio, onde longitudinali e trasversali. Soluzione delle eq.ni di Maxwell nel vuoto. Legge di Snell. Coefficienti di riflessione e di trasmissione. Riflessione totale. Dispersione della luce (prisma). Interferenza. Diffrazione.

Modalità di esame :

L'esame consiste in una prova scritta e in una prova orale da sostenere dopo aver passato lo scritto con almeno 18/30.

Criteri di valutazione :

Verifica scritta delle capacità di applicare le leggi della fisica a problemi pratici.

Verifica orale della comprensione delle basi della fisica.

Testi di riferimento :

P. Mazzoldi, M. Nigro e C. Voci, Elementi di Fisica - Elettromagnetismo. : EdiSes,

P. Mazzoldi, M. Nigro e C. Voci, Elementi di Fisica - Onde. : EdiSes,

Halliday, Resnick, Krane, Fisica II. : Ed. Ambrosiana,

Zotto, Lo Russo, Sartori, Fisica Generale: Elettromagnetismo, Ottica. LaDotta: , 2016

FORMAZIONE PER LE SCELTE PROFESSIONALI

(Titolare: Prof.ssa GIULIA MARINA LICINI)

Periodo: III anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: +10E; 1,00 CFU

INDUSTRIA CHIMICA

(Titolare: Prof. STEFANO MAMMI)

Periodo: Il anno, 1 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 40A+10E; 6,00 CFU

Prerequisiti :

Nessuno

Conoscenze e abilità da acquisire :

Conoscenze essenziali sulla moderna industria chimica: fonti di materie prime, impatto ambientale delle lavorazioni industriali chimiche, problemi di produzione su larga scala.

Conoscenze di base sulla produzione e caratterizzazione di materiali polimerici.

Comprensione delle dinamiche aziendali. Stesura di un efficace curriculum. Conoscenza di alcune aziende del territorio.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni d'aula e seminari.

Contenuti :

Storia e sviluppo dell'industria chimica. Sviluppo sostenibile. Green Chemistry. Salute e sicurezza in industria. Aspetti merceologici (scale di produzione). Aspetti aziendali (organizzazione, marketing). Aspetti economici (determinazione dei costi). Ricerca e Sviluppo.

Aspetti brevettuali. Materie prime ed energia: risorse nella litosfera e nella biosfera e loro principali trasformazioni. Risorse non rinnovabili con cenni di petrolchimica. Polimeri: ottenimento dei principali monomeri; classificazione dei principali polimeri; meccanismi di polimerizzazione; costituzione, configurazione e conformazione; pesi molecolari - definizione e metodi di misura; descrizione dei principali polimeri e delle loro caratteristiche; cristallizzazione; transizione vetrosa; proprietà meccaniche. Sintesi dell'ammoniaca. Risorse rinnovabili. Catalisi e catalizzatori industriali. Reattori industriali. Operazioni unitarie. Separazioni industriali. Controllo di processo.

Passaggi di scala: impianti pilota, impianti industriali.

Interventi di rappresentanti dell'industria locale.

Modalità di esame :

Test scritto con domande aperte e domande a risposta multipla.

Criteria di valutazione :

Sarà valutata l'acquisizione delle conoscenze e delle abilità π^1 sopra descritte.

Testi di riferimento :

A.I.M., *Fondamenti di Scienza dei Polimeri*. : Pacini Editore,

A. Heaton, *An Introduction to Industrial Chemistry*. : Blackie A & P,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Dispense ed appunti di lezione.

Testi di consultazione: "Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry", 6th Edn., Wiley-VCH, 1998 - Electronic Release (Disponibile online al sito <http://www.cab.unipd.it/> alla voce "banche dati")

LINGUA INGLESE

(Titolare: Prof. MARCO RUZZI)

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: ; 3,00 CFU

MATEMATICA

(Titolare: Prof. FRANCESCO BALDASSARRI) - Mutuato da: Laurea in Chimica Industriale (Ord. 2014)

Periodo: I anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 64A+70E; 15,00 CFU

Prerequisiti :

Nessuno

Conoscenze e abilità da acquisire :

Conoscenze matematiche di base per corsi di laurea in discipline scientifiche.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni ed esercitazioni in aula.

Contenuti :

Nozioni di base. Numeri reali. Disequazioni. Elementi di trigonometria. Esponenziali e logaritmi. Sommatorie. Fattoriali. Coefficienti binomiali. Formula del binomio di Newton.

Funzioni reali di una variabile reale. Successioni. Limiti. Funzioni continue. Derivate. Retta tangente al grafico di una funzione. Teoremi fondamentali del calcolo differenziale. Massimi e minimi relativi e assoluti. Funzioni trigonometriche esponenziali e logaritmiche. Studio di una funzione. Integrali definiti e indefiniti. Volumi di solidi di rotazione. Lunghezze di grafici di funzione. Integrali generalizzati.

Serie numeriche. Nozioni generali. Serie geometrica. Serie armonica. Serie telescopiche. Serie a termini non negativi/positivi. Criteri di convergenza. Convergenza per serie a termini di segno alterno. Serie di Taylor e di Maclaurin. Approssimazioni.

Cenni sui numeri complessi. Piano di Gauss. Rappresentazione trigonometrica dei numeri complessi. Formule di Eulero. Cenni sulle funzioni trigonometriche ed esponenziale in campo complesso.

Equazioni differenziali. Equazioni differenziali del primo ordine lineari e a variabili separabili. Modelli descritti da equazioni differenziali lineari del primo ordine. Equazioni differenziali del secondo ordine lineari a coefficienti costanti. Applicazioni: moto armonico semplice, moto armonico con viscosità, moto armonico con forza esterna sinusoidale. Risonanza.

Vettori e geometria analitica dello spazio tridimensionale. Vettori nel piano e nello spazio. Prodotto scalare, prodotto vettore, prodotto misto e loro interpretazione geometrica. Equazioni parametriche e cartesiane di rette e piani nello spazio tridimensionale. Angoli e distanze.

Elementi algebra lineare. Spazi vettoriali. Dipendenza lineare. Basi di uno spazio vettoriale. Matrici e trasformazioni lineari.

Determinanti. Sistemi lineari. Teorema di Rouché-Capelli. Autovettori e autovalori. Diagonalizzazione.

Funzioni di π^1 variabili. Limiti. Continuità. Derivate parziali. Differenziabilità. Piani tangenti. Curve di livello. Derivata direzionale. Vettore gradiente. Massimi e minimi relativi. Punti di sella. Massimi e minimi vincolati.

Modalità di esame :

Scritto con eventuale orale

Criteria di valutazione :

Viene valutata la correttezza formale e l'eventuale creatività nella risoluzione di esercizi inerenti ai contenuti del corso.

Testi di riferimento :

CONTENUTO NON PRESENTE

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

I testi di riferimento verranno comunicati all'inizio del corso.

Saranno fornite dispense redatte dai docenti, esercizi integrativi, compiti svolti.

METODI DI CALCOLO PER LA CHIMICA

(Titolare: Prof. ANTONINO POLIMENO)

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 24A+30E; 6,00 CFU

Prerequisiti :

Istituzioni di matematiche; chimica generale

Conoscenze e abilità da acquisire :

Obiettivi formativi: lâ€™ applicazione quantitativa e non solo qualitativa dei principi della chimica richiede lâ€™ impiego di metodi di calcolo ed algoritmi specifici.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni frontali ed esercitazioni

Contenuti :

Il corso si propone di presentare agli studenti interessati (di chimica, chimica industriale, scienza dei materiali) una serie di casi dettagliati, tratti da problemi concreti suggeriti dalla pratica sperimentale nei vari settori della chimica generale, inorganica, analitica, industriale e fisica, il cui trattamento quantitativo richiede lâ€™ approfondimento dei metodi numerici piÃ¹ comuni. Lâ€™ accento sarÃ posto i) sulla definizione del principio matematico alla base dellâ€™ approccio numerico, ii) sulla metodologia (algoritmo) di risoluzione, e iii) sullâ€™ implementazione pratica, anche mediante lâ€™ impiego di software dedicato. Una serie di esercitazioni daranno modo agli studenti di applicare in modo autonomo i principi appresi a problemi di interesse chimico.

Programma: ogni argomento Ã affrontato con un richiamo dei concetti matematici di base (1-2 ore) la definizione di uno o piÃ¹ esempi di interesse chimico (1 ora) ed una dettagliata descrizione di un metodo numerico di soluzione con applicazione diretta (2-3 ore). Gli esempi elencati di seguito sono solo indicativi.

1. Sistemi di equazioni lineari; problemi agli autovalori

1.1. Calcolo dei livelli energetici di un composto aromatico secondo lâ€™ approssimazione di Huckel

1.2. Calcolo delle frequenze vibrazionali di una molecola triatomica

2. Interpolazione e modeling di dati; massimi e minimi di funzioni

2.1. Calcolo del minimo di energia di un sistema molecolare descritto da un campo di forza classico

3. Integrazione numerica

3.1. Calcolo dellâ€™ entropia di una sostanza pura da dati calorimetrici

4. Equazioni non-lineari

4.1. Equilibri chimici in fase omogenea ed eterogenea

4.2. Calcolo dei punti nodali degli orbitali idrogenoidi

5. Variabili complesse e trasformate

5.1. Trasformate di Fourier e Fourier-Laplace

6. Equazioni differenziali:

6.1. Soluzione numerica di un sistema equazioni cinetiche per un meccanismo di reazione complesso

6.2. Soluzione numerica dellâ€™ equazione di Schroedinger per un sistema confinato in 1D e 2D

Modalità di esame :

Prova orale

Testi di riferimento :

CONTENUTO NON PRESENTE

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Dispense ed appunti di lezione

MINERALOGIA

(Titolare: Prof.ssa ALBERTA SILVESTRI)

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 32A+24E; 6,00 CFU

Prerequisiti :

Nozioni apprese dai corsi di Matematica, Chimica generale e inorganica e Fisica.

Conoscenze e abilità da acquisire :

Il corso intende fornire agli studenti del Corso di laurea in Chimica le nozioni basilari per la comprensione delle proprietÃ geometrico-strutturali e chimico-fisiche che interessano i materiali cristallini naturali o di sintesi, nonchÃ© unâ€™ introduzione alle principali tecniche di caratterizzazione dei materiali stessi: metodi diffrattometrici a raggi X su polveri e su cristallo singolo, fluorescenza dei raggi X, microsonda elettronica e microscopia elettronica a scansione. Il corso verrÃ integrato anche da nozioni di Mineralogia applicata per fornire unâ€™ introduzione ai molteplici campi applicativi della mineralogia moderna.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni frontali ed esercitazioni di cristallografia morfologica e strutturale, diffrattometria X, calcolo di formule cristallografiche e riconoscimento macroscopico dei minerali. Sono inoltre previste visite ai laboratori di diffrazione a raggi X su polveri e su cristallo singolo, di microsonda elettronica, fluorescenza a raggi X e microscopia elettronica a scansione del Dipartimento di Geoscienze.

Contenuti :

1) Cristallografia morfologica e strutturale: reticolo cristallino, cella elementare, simmetria puntuale, sistemi cristallini e classi di simmetria, reticoli di Bravais, elementi di simmetria con componente traslazionale, i gruppi spaziali. Cenni sulla proiezione stereografica dei cristalli.

2) Principali metodologie analitiche usate in Mineralogia: teoria della diffrazione dei raggi X da parte dei cristalli: generalitÃ sulle radiazioni X; interazioni tra radiazioni X e cristallo; interpretazioni di Laue, di Bragg e di Ewald, reticolo reciproco, forma del reticolo reciproco e sue relazioni col reticolo diretto; intensitÃ di un effetto di diffrazione, il fattore di struttura. Cenni sui generatori e i rivelatori di raggi X; il metodo della diffrazione a raggi X su polveri; metodi a cristallo singolo; tecniche spettrometriche a raggi X: microsonda elettronica e fluorescenza. Microscopia elettronica a scansione.

3) Cristallografia chimica: composizione della litosfera e abbondanza degli elementi; tipi di legame nelle strutture cristalline; raggio ionico; isomorfismo, poliedri e numeri di coordinazione; regole di Pauling; polimorfismo; Esempi di strutture cristalline ideali e difettuali. Calcolo della formula cristallografica di un minerale.

4) Cristallografia fisica: le proprietÃ fisiche dei minerali e loro relazioni con la cristallografia morfologica e strutturale e la cristallografia chimica.

5) Principi generali di mineralogia sistematica: generalitÃ , composizione, struttura e caratteristiche fisiche dei piÃ¹ comuni minerali delle seguenti classi: elementi nativi, solfuri, alogenuri, ossidi e idrossidi, carbonati, solfati, fosfati, silicati.

6) Cenni ai molteplici campi applicativi della Mineralogia.

Modalità di esame :

Prova orale con domande aperte sui contenuti del corso.

Prova pratica: riconoscimento della simmetria in modelli di cristalli e descrizione morfologica degli stessi; riconoscimento macroscopico di minerali; calcolo di formule cristallografiche.

Criteri di valutazione :

Verifica della comprensione da parte dello studente dei principi generali di cristallografia morfologica e strutturale, di cristallografia chimica e di mineralogia sistematica, nonché dei principali metodi di indagine in ambito mineralogico. Verranno inoltre valutate le nozioni acquisite dallo studente nei molteplici campi applicativi della Mineralogia, nonché la sua capacità di porre in relazione fra loro tutti i contenuti del corso, quale strumento di piena comprensione delle conoscenze acquisite.

Testi di riferimento :

Klein C., Mineralogia. Bologna: Zanichelli, 2004

Carobbi G., Mineralogia, vol. 1 "Fondamenti di cristallografia e ottica cristallografica" e vol. 2 "Cristallografia chimica e mineralogia speciale". Firenze: USES, 1983

Putnis A., Introduction to Mineral Science. Cambridge: Cambridge University Press, 1992

Bonatti S., Franzini M., Cristallografia mineralogica. Torino: Boringhieri, 1972

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Appunti di lezione.

È inoltre consigliata la consultazione dei testi di riferimento riportati nella relativa sezione e disponibili presso la biblioteca del Dipartimento di Geoscienze.

PROVA FINALE

(Titolare: da definire)

Periodo: III anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: ; 5,00 CFU

SICUREZZA NEI LABORATORI

(Titolare: Prof. SAVERIO SANTI) - Mutuato da: Laurea in Chimica Industriale (Ord. 2014)

Periodo: I anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 8A; 1,00 CFU