



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO  
Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali



PIANI DEGLI STUDI  
E PROGRAMMI DEGLI INSEGNAMENTI  
DEL CORSO DI LAUREA IN

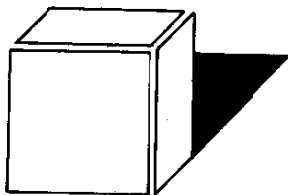
# CHIMICA E CHIMICA INDUSTRIALE

(NUOVO ORDINAMENTO)

1° e 2° anno

(VECCHIO ORDINAMENTO)

4° e 5° anno



anno accademico 1991-92

## AVVERTENZA

I dati riportati in questa edizione 1991-92 del Libretto sono aggiornati al Luglio 1991 e si riferiscono al Nuovo Ordinamento e al Vecchio Ordinamento dei Corsi di Laurea in Chimica e in Chimica Industriale.

Eventuali variazioni rispetto a quanto riportato saranno comunicate con avviso affisso alle bacheche della Segreteria Didattica, atrio di via Venezian, 21.

---

A partire dall'a.a. 1991-92 sono attivati il 1° e 2° Anno riformato secondo il Nuovo Ordinamento dei Corsi di Laurea in Chimica e in Chimica Industriale. I ciclostilati sui "Piani di studio - Vecchio Ordinamento" e "Piani di studio - Nuovo Ordinamento" sono in distribuzione presso le Segreterie di Facoltà, via Celeria, 20

---

Milano, Luglio 1991

LA SEGRETERIA DIDATTICA

## INDICE

### CORSO DI LAUREA IN CHIMICA

Piani di studio: note illustrative	Nuovo Ordinamento .....	pag.
	Vecchio Ordinamento .....	
Norme per la compilazione del piano di studio secondo lo statuto (V.O.)	.....	
Norme per la compilazione del piano di studio liberalizzato (V.O.)	.....	
Norme per la compilazione del piano di studio orientato (V.O.)	.....	
Norme comuni a tutti i piani di studio (V.O.)	.....	
Trasferimenti	.....	
Regolamento per lo svolgimento della tesi di laurea	.....	
Date Sedute di Laurea e Ingressi in tesi 1992	.....	
Calendario Lezioni ed esami a.a. 1991-92	.....	
Programmi degli insegnamenti	.....	
Consiglio e Segreteria del corso di laurea in Chimica	.....	
Elenco alfabetico degli insegnamenti	.....	
Elenco alfabetico dei docenti e loro sedi	.....	

### CORSO DI LAUREA IN CHIMICA INDUSTRIALE

Piani di studio: note illustrative	Nuovo Ordinamento .....	pag.
	Vecchio Ordinamento .....	
Norme per la compilazione del piano di studio secondo lo statuto (V.O.)	.....	
Norme per la compilazione del piano di studio liberalizzato (V.O.)	.....	
Norme per la compilazione del piano di studio orientato (V.O.)	.....	
Norme comuni a tutti i piani di studio (V.O.)	.....	
Regolamento per lo svolgimento della tesi di laurea	.....	
Date Sedute di Laurea e Ingressi in tesi 1992	.....	
Calendario Lezioni ed Esami a.a. 1991-92	.....	
Programmi degli insegnamenti	.....	
Consiglio e Segreteria del corso di laurea in Chimica Industriale	.....	
Elenco alfabetico degli insegnamenti	.....	
Elenco alfabetico dei docenti e loro sedi	.....	
<hr/>		
Indirizzi dei dipartimenti e degli istituti sedi dei docenti dei Corsi di Laurea in Chimica e in Chimica industriale	.....	
ELENCO ARGOMENTI DI TESI	.....	

**CORSO DI LAUREA IN CHIMICA**  
**1° e 2° anno (NUOVO ORDINAMENTO)**  
**3°, 4° e 5° anno (VECCHIO ORDINAMENTO)**

## NOTE ILLUSTRATIVE DEL NUOVO ORDINAMENTO

Il Nuovo Ordinamento, in vigore per l'a.a. 1991-92, prevede per il Corso di Laurea in Chimica un *Triennio Propedeutico* ed un *Biennio di Specializzazione*. Per quanto riguarda l'esenzione dalle tasse ed ogni previsione a favore degli studenti meritevoli, si stabilisce il seguente piano di studio quantitativo:

- non meno di 4 esami al termine del 1° anno
- non meno di 8 esami al termine del 2° anno
- non meno di 14 esami al termine del 3° anno
- non meno di 18 esami al termine del 4° anno

Per il conseguimento della Laurea in Chimica lo studente deve superare 23 esami scelti tra quelli impartiti nell'Università degli Studi di Milano secondo le norme di seguito riportate.

Il corso degli studi è strutturato in *Semestri* e gli insegnamenti previsti per il *Triennio* sono elencati nel piano degli studi riportato di seguito.

I Corsi di Laboratorio hanno l'esame in comune con il Corso Teorico corrispondente.

I due Corsi di "Laboratorio di Chimica Analitica" prevedono un solo esame alla fine del secondo corso.

### ORGANIZZAZIONE DEGLI STUDI

(Insegnamenti previsti dal Piano Didattico per il Corso di Laurea secondo il Nuovo Ordinamento)

#### Triennio di studi propedeutici

\*\* La numerazione < > si riferisce agli esami da sostenere (16 nel Triennio e 7 nel Biennio successivo).

#### PRIMO ANNO

1° Semestre	
Insegnamenti	Esami
<i>Istituzioni di Matematiche 1° corso</i>	<1>
<i>Chimica Generale ed Inorganica</i>	<2>
<i>Laboratorio di Chimica Generale ed Inorganica</i>	<2>
2° Semestre	
<i>Fisica Generale 1° corso</i>	<3>
<i>Istituzioni di Matematiche 2° corso</i>	<4>
<i>Laboratorio di Chimica Analitica 1° corso</i>	<5>

#### SECONDO ANNO

1° Semestre	
Insegnamenti	Esami
<i>Laboratorio di Chimica Analitica 2° corso</i>	<5>
<i>Fisica Generale 2° corso</i>	<6>
<i>Calcolo Numerico</i>	<7>
<i>Laboratorio di Programmazione e Calcolo</i>	<7>
<i>Chimica Organica 1° corso</i>	<8>
2° Semestre	
<i>Laboratorio di Fisica Generale</i>	<6>
<i>Laboratorio di Chimica Organica 1° corso</i>	<8>
<i>Chimica Fisica 1° corso</i>	<9>
<i>Laboratorio di Chimica Fisica 1° corso</i>	<9>
<i>Chimica Inorganica 1° corso</i>	<10>

#### TERZO ANNO

1° Semestre	
Insegnamenti	Esami
<i>Laboratorio di Chimica Inorganica 1° corso</i>	<10>
<i>Chimica Fisica 2° corso</i>	<11>
<i>Chimica Organica 2° corso</i>	<12>
<i>Chimica Analitica</i>	<13>
<i>Laboratorio di Chimica Analitica</i>	<13>
<i>Chimica Biologica</i>	<14>
2° Semestre	
<i>Laboratorio di Chimica Fisica 2° corso</i>	<11>
<i>Laboratorio di Chimica Organica 2° corso</i>	<12>
<i>Opzionale*</i>	<15>
<i>Opzionale*</i>	<16>

\* = Da scegliere tra gli 8 Corsi Opzionali.

#### Biennio di studi di specializzazione

Sono ammessi al 4° anno gli studenti che abbiano superato gli esami del triennio propedeutico. È comunque consentita l'iscrizione al 4° anno in difetto di 2 soli esami del triennio che dovranno essere sostenuti prima di quelli del biennio.

Il biennio si articola in indirizzi.

Gli indirizzi sono caratterizzati da due insegnamenti fondamentali comuni a tutti i piani di studio dell'indirizzo, con i rispettivi laboratori o esercitazioni, e da cinque insegnamenti opzionali da scegliere tra quelli attivati nella sede.

Sono previsti i seguenti indirizzi:

- indirizzo chimica inorganica
- indirizzo chimica fisica
- indirizzo chimica organica

I corsi fondamentali sono:

Indirizzo: chimica inorganica

- 1 - chimica inorganica (secondo corso)
- 2 - chimica inorganica (terzo corso)
- 3 - laboratorio di chimica inorganica (secondo corso)
- 4 - laboratorio di chimica inorganica (terzo corso)

I corsi di chimica inorganica (secondo corso) e laboratorio di chimica inorganica (secondo corso) danno luogo ad una prova di accertamento unica così come i corsi di chimica inorganica (terzo corso) e laboratorio di chimica inorganica (terzo corso).

Indirizzo: chimica fisica

- 1 - chimica fisica (terzo corso)
- 2 - chimica fisica (quarto corso)
- 3 - laboratorio di chimica fisica (terzo corso)
- 4 - laboratorio di chimica fisica (quarto corso)

I corsi di chimica fisica (terzo corso) e laboratorio di chimica fisica (terzo corso) danno luogo ad una prova di accertamento unica così come i corsi di chimica fisica (quarto corso) e laboratorio di chimica fisica (quarto corso).

Indirizzo: chimica organica

- 1 - chimica organica (terzo corso)
- 2 - chimica organica (quarto corso)
- 3 - laboratorio di chimica organica (terzo corso)
- 4 - laboratorio di chimica organica (quarto corso)

I corsi di chimica organica (terzo corso) e laboratorio di chimica organica (terzo corso) danno luogo ad una prova di accertamento unica così come i corsi di chimica organica (quarto corso) e laboratorio di chimica organica (quarto corso).

Gli insegnamenti non opzionali sono i seguenti:

- 1 - analisi chimica applicata
- 2 - analisi chimica dei prodotti alimentari
- 3 - analisi degli inquinanti
- 4 - biochimica applicata
- 5 - biochimica fisica
- 6 - biopolimeri
- 7 - catalisi
- 8 - chemiometria
- 9 - chimica ambientale
- 10 - chimica analitica clinica
- 11 - chimica analitica strumentale
- 12 - chimica applicata
- 13 - chimica bio-inorganica
- 14 - chimica bio-organica

- 15 - chimica bromatologica
- 16 - chimica dei composti di coordinazione
- 17 - chimica dei composti metallorganici
- 18 - chimica dei composti eterociclici
- 19 - chimica delle sostanze organiche naturali
- 20 - chimica degli inquinanti
- 21 - chimica del restauro
- 22 - chimica fisica biologica
- 23 - chimica fisica dei materiali
- 24 - chimica fisica organica
- 25 - chimica industriale
- 25 - chimica macromolecolare
- 27 - chimica nucleare
- 28 - chimica organica fisica
- 29 - chimica teorica
- 30 - cinetica chimica
- 31 - elettrochimica
- 32 - fotochimica
- 33 - metodi fisici in chimica organica
- 34 - radiochimica
- 35 - scienza dei materiali
- 36 - spettroscopia
- 37 - strutturistica chimica

L'elenco dei complementari è provvisorio ed incompleto in quanto la tabella è in revisione da parte del C.U.N.

Per essere ammessi a sostenere l'esame di laurea lo studente deve aver seguito tutti i corsi previsti dal piano di studio approvato dalla facoltà e superato i relativi esami. Lo studente deve aver inoltre svolto il lavoro di tesi sperimentale. L'esame di laurea consiste nella discussione della tesi sperimentale con le modalità stabilite dal consiglio del corso di laurea, in applicazione alle disposizioni vigenti.

**PIANI DI STUDIO DEL CORSO DI LAUREA  
IN CHIMICA  
(VECCHIO ORDINAMENTO)**

La durata del Corso di Studi per il conseguimento della Laurea in Chimica è di cinque anni divisi in un *Biennio Propedeutico* e in un *Triennio di Studi di Applicazione*.

Per quanto riguarda l'esenzione dalle tasse ed ogni previdenza a favore degli studenti meritevoli, si stabilisce il Piano di Studio quantitativo seguente:

- non meno di 5 esami al termine del 1° anno
- non meno di 11 esami al termine del 2° anno
- non meno di 17 esami al termine del 3° anno
- non meno di 24 esami al termine del 4° anno.

Per il conseguimento della Laurea in Chimica lo studente deve superare 30 esami tra gli insegnamenti impartiti nell'Università degli Studi di Milano, tenendo conto delle norme di seguito riportate:

Nell'ordine vengono riportate:

- 1) Le norme per la compilazione del Piano di Studio *secondo lo Statuto dell'Università degli Studi di Milano*;
- 2) Le norme per la compilazione del Piano di Studio *Liberalizzato*;
- 3) Le norme per la compilazione del Piano di Studio *Orientato*:
  - I *Elettrochimico*;
  - II *Organometallico*;
  - III *Inorganico - Strutturistico*;
  - IV *Chimico Fisico Teorico*
  - V *Inorganico - Chimico Fisico*;
  - VI *Chimico Fisico - Organico*;
  - VII *Organico di Sintesi*;
  - VIII *Bio-Organico*
  - IX *Analitico - Applicativo*
- 4) Le norme comuni a tutti i Piani di Studio.

Dopo la liberalizzazione queste norme rappresentano suggerimenti per un logico ed ordinato curriculum.

# 1) NORME PER LA COMPILAZIONE DEL PIANO DI STUDIO SECONDO LO STATUTO

## Biennio propedeutico - disattivato

### *I ANNO (disattivato a partire dall'a.a. 90/91)*

1	F01066	CHIMICA GENERALE ED INORGANICA I
2	F01009	ESERCITAZIONI DI PREPARAZIONI CHIMICHE I
3	F01068	CHIMICA ORGANICA I (consigliato al II anno)
4	F01060	ISTITUZIONI DI MATEMATICHE I
5	F01062	ESERCITAZIONI DI MATEMATICHE I
6	F01064	FISICA SPERIMENTALE I
7	F01006	MINERALOGIA CON ESERCITAZIONI PRATICHE

### *II ANNO (disattivato a partire dall'a.a. 91/92)*

1	F01067	CHIMICA GENERALE ED INORGANICA II
2	F01010	ESERCITAZIONI DI ANALISI CHIMICA QUALITATIVA
3	F01069	CHIMICA ORGANICA II (consigliato al III anno)
4	F01061	ISTITUZIONI DI MATEMATICHE II
5	F01063	ESERCITAZIONI DI MATEMATICHE II
6	F01065	FISICA SPERIMENTALE II
7	F01011	ESERCITAZIONI DI FISICA SPERIMENTALE
8	F01076	ESERCITAZIONI DI PREPARAZIONI CHIMICHE II



## INSEGNAMENTI IMPARTITI DALL'A.A. 1991/92

### Triennio di studi di applicazione

Il Triennio di Studi di Applicazione comprende due Indirizzi:

- a) ORGANICO-BIOLOGICO
- b) INORGANICO-CHIMICO-FISICO

Ciascun Indirizzo comprende insegnamenti Fondamentali comuni ed insegnamenti Complementari, da scegliersi in numero di sette tra quelli indicati per ognuno dei due Indirizzi.

### III ANNO

1	F01004	CHIMICA ANALITICA
2	F01013	ESERCITAZIONI DI ANALISI CHIMICA QUANTITATIVA
3	F01070	CHIMICA FISICA I
4	F01072	ESERCITAZIONI DI CHIMICA FISICA I
5	F01069	CHIMICA ORGANICA II
6	F01015	ESERCITAZIONI DI CHIMICA ORGANICA E ANALISI ORGANICA
7,8	.....	DUE INSEGNAMENTI COMPLEMENTARI

### IV ANNO

1	F01071	CHIMICA FISICA II
2	F01073	ESERCITAZIONI DI CHIMICA FISICA II
3	F01089	METODI FISICI IN CHIMICA ORGANICA
4,5	.....	DUE INSEGNAMENTI COMPLEMENTARI

### V ANNO

1,2,3	.....	TRE INSEGNAMENTI COMPLEMENTARI
-------	-------	--------------------------------

Lo studente deve, inoltre, frequentare i laboratori per la preparazione della tesi di laurea.

## INSEGNAMENTI COMPLEMENTARI

(impartiti nell'a.a. 1991/92)

Indirizzo: ORGANICO-BIOLOGICO

			anno
1	F01096	CHIMICA DEI COMPOSTI ETEROCICLICI	IV
2	F01029	CHIMICA ORGANICA APPLICATA	III
3	F01042	STRUTTURISTICA CHIMICA	III
4	F01035	CHIMICA FISICA ORGANICA	IV
5	F01025	CHIMICA ORGANICA SUPERIORE	IV
6	F01027	ELETTROCHIMICA ORGANICA CON ESERCIT.	IV
7	F01024	ESERCIT. DI TECNICA E SINTESI SPEC. ORG.	V
8	F01032	CHIMICA DELLE SOSTANZE ORGANICHE NATUR.	IV
9	F01028	CHIMICA DELLE FERMENTAZIONI	V
10	F01026	CHIMICA MACROMOLECOLARE	V
11	F01034	SPETTROSCOPIA MOLECOLARE	V
12	F01100	COMPLEMENTI DI CHIMICA ORGANICA	V
13	F01055	CHIMICA DEI COMPOSTI ELEMENTO-ORGANICI	IV/V
14	F01090	CRISTALLOCHIMICA	V
15	F01092	STEREOCHIMICA ORGANICA	V
16	F01108	CHIMICA BIOORGANICA (Corso libero par.)	IV/V

Indirizzo: **INORGANICO-CHIMICO-FISICO**

			anno
1	F01106	COMPLEMENTI DI CHIMICA FISICA	III
2	F01042	STRUTTURISTICA CHIMICA	III
3	F01059	METALLOGRAFIA	III
4	F01048	CHIMICA INORGANICA SUPERIORE	IV
5	F01036	ELETTROCHIMICA	IV
6	F01037	CHIMICA QUANTISTICA	IV
7	F01053	CINETICA CHIMICA	IV
8	F01041	SCIENZA DEI METALLI	IV
9	F01109	CHIMICA DEI COMPOSTI DI COORDINAZIONE	IV/V
10	F01055	CHIMICA DEI COMPOSTI ELEMENTO-ORGANICI	IV/V
11	F01105	CHIMICA FISICA DELLE INTERFASI	V
12	F01050	CHIMICA FISICA DELLO STATO SOLIDO	V
13	F01038	CHIMICA TEORICA	V
14	F01058	CORROSIONE E PROTEZIONE DEI METALLI	V
15	F01090	CRISTALLOCHIMICA	V
16	F01093	STEREOCHIMICA INORGANICA	V
17	F01016	ESERCIT. DI ANALISI CHIMICA APPLICATA	IV
18	F01006	MINERALOGIA CON ESERCIT. PRATICHE	III

**2). NORME PER LA COMPILAZIONE  
DEL PIANO DI STUDIO LIBERALIZZATO**

Il Piano di Studio Liberalizzato rispetta le seguenti indicazioni nella compilazione:

- a) Indicazione dell'Indirizzo (Organico-Biologico o Inorganico-Chimico Fisico).
- b) Le possibilità di sostituire Mineralogia con Esercitazioni Pratiche ed Esercitazioni di Fisica Sperimentale con un ugual numero di insegnamenti della Facoltà di Scienze M.F.N. o con un insegnamento di argomento chimico di altre Facoltà, inclusa una Lingua Straniera.  
Come criterio generale non può essere scelto un insegnamento del Corso di Laurea in Chimica Industriale se esiste un insegnamento equivalente nel Corso di Laurea in Chimica (questa norma non riguarda le Lingue Straniere).  
Analogamente non può essere scelto un insegnamento equivalente di altro Corso di Laurea se esiste un insegnamento equivalente nei Corsi di Laurea in Chimica e in Chimica Industriale, o quello di altre Facoltà se esiste un insegnamento equivalente della Facoltà di Scienze M.F.N.
- c) Indirizzo ORGANICO-BIOLOGICO:  
L'insegnamento di Chimica Fisica Organica sostituisce l'insegnamento di Chimica Fisica II.  
Gli insegnamenti di Chimica dei Composti Eterociclici, Chimica Organica Applicata e Chimica Organica Superiore sono irrinunciabili.  
Quattro insegnamenti Complementari possono essere scelti tra quelli della Tabella A.

*Tabella A*

1. Chimica delle Sostanze Organiche Naturali
2. Chimica delle Fermentazioni
3. Chimica Biologica (Scienze Biologiche)
4. Chimica Bioorganica (Corso Libero Pareggiato)
5. Complementi di Chimica Organica
6. Esercitazioni di Tecniche e Sintesi Speciali Organiche
7. Stereochimica Organica
8. Chimica dei Composti Elemento-Organici
9. Chimica Organica Industriale
10. Chimica Macromolecolare
11. Preparazioni di Chimica Organica (Chimica Industriale)
12. Cinetica Chimica
13. Spettroscopia Molecolare
14. Elettrochimica Organica con Esercitazioni
15. Complementi di Chimica Fisica
16. Chimica Quantistica
17. Chimica Teorica

Si fa notare che i gruppi di insegnamenti 1-4, 5-8, 8-11 e 12-17 rappresentano esempi di omogeneità e integrazioni culturale.

Si consigliano gli studenti di seguire nella scelta un criterio analogo.

d) Indirizzo INORGANICO-CHIMICO FISICO:

L'insegnamento di Metodi Fisici in Chimica Organica è sostituibile da uno dei seguenti insegnamenti: Esercitazioni di Analisi Chimica Applicata, Elettrochimica, Chimica dei Composti di Coordinazione, Complementi di Chimica Fisica, a seconda dell'orientamento dello studente.

Sette insegnamenti Complementari possono essere scelti tra quelli riportati nella Tabella B.

Tabella B

1. Complementi di Chimica Fisica (a)
  2. Strutturistica Chimica
  3. Metallografia
  4. Chimica Inorganica Superiore
  5. Elettrochimica (a)
  6. Chimica Quantistica
  7. Cinetica Chimica
  8. Scienza dei Metalli
  9. Corrosione e Protezione dei Metalli
  10. Chimica Fisica delle Interfasi
  11. Chimica dei Composti Elemento-Organici
  12. Stereochimica Inorganica
  13. Chimica Teorica
  14. Chimica Fisica dello Stato Solido
  15. Cristallografia
  16. Chimica dei Composti di Coordinazione (a)
  17. Esercitazioni di Analisi Chimica Applicata (a)
  18. Misure Elettriche (Chimica Industriale)
  19. Teoria degli Elettroliti (Chimica Industriale)
  20. Elettrochimica Industriale (Chimica Industriale)
  21. Mineralogia con Esercitazione Pratiche
  22. Esercitazioni di Fisica Sperimentale
  23. Esercit. di Chimica Industriale I (Chimica Industriale)
  24. Chimica Macromolecolare
  25. Macchine Calcolatrici (Fisica)
  26. Metodi Matematici della Fisica (Fisica)
  27. Chimica Fisica Organica
  28. Spettroscopia Molecolare
  29. Metodi Fisici in Chimica Organica
  30. Chimica dei Composti Eterociclici
  31. Chimica Organica Superiore
- (a) Può sostituire Metodi Fisici in Chimica Organica

Si consigliano gli studenti di seguire nella scelta degli esami i criteri suggeriti nei Piani Orientati n. I-VI e IX (vedi oltre).

Guida riassuntiva alla compilazione dei Piani di Studio Liberalizzati

Indirizzo ORGANICO-BIOLOGICO	Indirizzo INORGANICO-CHIMICO FISICO
19 Insegnamenti Fondamentali (n. 1-5, 7-14, 16-20, 22 del modulo dei Piani di Studio)	
2 Chimica Fisica Organica Metodi Fisici in Chimica Organica	Chimica Fisica II Uno dei seguenti corsi: * - Eserc. di Analisi Chimica Applicata - Elettrochimica - Complementi di Chimica Fisica - Chimica dei Composti Coordinazione
2 Insegnamenti Liberi (inclusa una Lingua Straniera) **	
7 Chimica Composti Eterociclici Chimica Organica Superiore Chimica Organica Applicata e, inoltre: quattro insegnamenti della Tabella A	Sette insegnamenti della Tabella B

30 esami totali

\* Inserire al n. 23 del modulo

\*\* Inserire al n. 6 e 15 del modulo

### 3) NORME PER LA COMPILAZIONE DEL PIANO DI STUDIO ORIENTATO

Allo studente che desidera essere indirizzato verso un particolare settore della Chimica, vengono proposti *nove piani di studio*, con differenti orientamenti caratterizzati da una scelta omogenea e integrata di insegnamenti.

Ciascun piano di studio comprende:

- a) Un gruppo di 19 insegnamenti fondamentali, comuni a tutti gli orientamenti nel piano di studio:

Insegnamenti	anno
1 ISTITUZIONI DI MATEMATICHE I	I
2 ESERCITAZIONI DI MATEMATICHE I	I
3 ISTITUZIONI DI MATEMATICHE II	II
4 ESERCITAZIONI DI MATEMATICHE II	II
5 FISICA SPERIMENTALE I	I
6 FISICA SPERIMENTALE II	II
7 CHIMICA GENERALE ED INORGANICA I	I
8 CHIMICA GENERALE ED INORGANICA II	II
9 ESERCITAZIONI DI PREPARAZIONI CHIMICHE I	I
10 ESERCITAZIONI DI PREPARAZIONI CHIMICHE II	II
11 CHIMICA ORGANICA I	I/II
12 CHIMICA ORGANICA II	II/III
13 ESERCIT. DI ANALISI CHIMICA QUALITATIVA	II
14 ESERCIT. DI ANALISI CHIMICA QUANTITATIVA	III
15 CHIMICA ANALITICA	III
16 CHIMICA FISICA I	III
17 ESERCITAZIONI DI CHIMICA FISICA I	III
18 ESERCIT. DI CHIMICA ORGANICA E ANALISI ORG.	III
19 ESERCITAZIONI DI CHIMICA FISICA II	IV

- b) Un gruppo di 6-8 insegnamenti caratterizzanti i singoli orientamenti che devono essere scelti in blocco per la qualifica dell'orientamento stesso.

- c) Un gruppo di 3 o più insegnamenti consigliati per i singoli orientamenti nell'ambito del quale lo studente può scegliere, a seconda delle preferenze o necessità di tesi, i rimanenti insegnamenti fino a raggiungere il numero di trenta.

Per i nove orientamenti, gli insegnamenti caratterizzati e gli insegnamenti consigliati sono i seguenti:

#### I) Piano orientato: **ELETTROCHIMICO**

Insegnamento	anno
<i>Insegnamenti Caratterizzanti (sei)</i>	
1 METALLOGRAFIA	III
2 ELETTROCHIMICA oppure ELETTROCHIMICA ORGANICA CON ESERCITAZIONI	IV
3 CHIMICA FISICA II	IV
4 CORROSIONE E PROTEZIONE DEI METALLI	V
5 MISURE ELETTRICHE (*)	IV
6 CHIMICA FISICA DELLE INTERFASI	V

#### *Insegnamenti consigliati (quattro su nove)*

1 MINERALOGIA CON ESERCITAZIONI PRATICHE	I
2 STRUTTURISTICA CHIMICA	III
3 CHIMICA INORGANICA SUPERIORE	IV
4 SCIENZA DEI METALLI	IV
5 ESERC. DI CHIMICA INDUSTRIALE I *	IV
6 CHIMICA FISICA DELLO STATO SOLIDO	V
7 STEREOCHIMICA INORGANICA	V
8 ELETTROCHIMICA INDUSTRIALE	V
9 TECNICHE DEGLI ELETTROLITI *	IV/V

(\*) Corso di Laurea in Chimica Industriale

#### II) Piano orientato: **ORGANOMETALLICO**

Insegnamento	anno
<i>Insegnamenti caratterizzanti (sette)</i>	
1 CHIMICA INORGANICA SUPERIORE	II
2 ELETTROCHIMICA ORGANICA CON ESERCITAZIONI	II
3 CHIMICA DEI COMPOSTI DI COORDINAZIONE	V

4	CHIMICA FISICA ORGANICA	IV
5	METODI FISICI IN CHIMICA ORGANICA	IV
6	STERECCHIMICA INORGANICA	IV
7	CHIMICA DEI COMPOSTI ELEMENTO-ORGANICI	IV/V

*Insegnamenti consigliati (quattro su sei)*

1	MINERALOGIA CON ESERCITAZIONI PRATICHE	I
2	STRUTTURISTICA CHIMICA	III
3	CINETICA CHIMICA	IV
4	CHIMICA ORGANICA SUPERIORE	IV
5	SPETTROSCOPIA MOLECOLARE	V
6	STEREOCHIMICA ORGANICA	V

**III) Piano orientato: INORGANICO STRUTTURISTICO**

*Insegnamento* anno

*Insegnamenti caratterizzanti (sette)*

1	MINERALOGIA CON ESERCITAZIONI PRATICHE	I
2	STRUTTURISTICA CHIMICA	III
3	CHIMICA INORGANICA SUPERIORE	III
4	CHIMICA FISICA II	IV
5	SCIENZA DEI METALLI	IV
6	CHIMICA FISICA DELLO STATO SOLIDO	IV
7	CRISTALLOCHIMICA	V

*Insegnamenti consigliati (quattro su otto)*

1	ESERCITAZIONI DI FISICA SPERIMENTALE	II
2	COMPLEMENTI DI CHIMICA FISICA	III
3	ELETTROCHIMICA	IV
4	CHIMICA DEI COMPOSTI DI COORDINAZIONE	IV
5	SPETTROSCOPIA MOLECOLARE	V
6	STEREOCHIMICA INORGANICA	IV

7	CHIMICA QUANTISTICA	V
8	CHIMICA TEORICA	V

*IV) Piano orientato. CHIMICO FISICO-TEORICO*

*Insegnamento* anno

*Insegnamenti caratterizzanti (sei)*

1	COMPLEMENTI DI CHIMICA FISICA	III
2	STRUTTURISTICA CHIMICA	III
3	CHIMICA FISICA II	IV
4	CHIMICA QUANTISTICA	IV
5	CHIMICA TEORICA	V
6	SPETTROSCOPIA MOLECOLARE	V

*Insegnamenti consigliati (cinque su dieci)*

1	ESERCITAZIONI DI FISICA SPERIMENTALE	II
2	MACCHINE CALCOLATRICI (1)	II
3	METODI MATEMATICI DELLA FISICA (1)	III
4	CHIMICA INORGANICA SUPERIORE	IV
5	METODI FISICI IN CHIMICA ORGANICA	IV
6	ELETTROCHIMICA	IV
7	SCIENZA DEI METALLI	IV
8	CHIMICA FISICA DELLO STATO SOLIDO	V
9	CRISTALLOCHIMICA	V
10	CHIMICA FISICA DELLE INTERFASI	V

(1) Corso di Laurea in Fisica

**V) Piano orientato: INORGANICO-CHIMICO FISICO**

*Insegnamento* anno

*Insegnamenti caratterizzanti (sette)*

1	CHIMICA INORGANICA SUPERIORE	III
2	ELETTROCHIMICA	III
3	COMPLEMENTI DI CHIMICA FISICA	III

4	CHIMICA DEI COMPOSTI DI COORDINAZIONE	IV
5	CHIMICA FISICA II	IV
6	STEREOCHIMICA INORGANICA	IV
7	CRISTALLOCHIMICA	V

*Insegnamenti consigliati (quattro su nove)*

1	MINERALOGIA CON ESERCITAZIONI PRATICHE	I
2	STRUTTURISTICA CHIMICA	III
3	TEORIA DEGLI ELETTROLITI (*)	III/IV
4	CHIMICA QUANTISTICA	IV
5	SCIENZA DEI METALLI	IV
6	CHIMICA TEORICA	V
7	CHIMICA FISICA DELLO STATO SOLIDO	V
8	SPETTROSCOPIA MOLECOLARE	V
9	CHIMICA FISICA DELLE INTERFASI	V

(\*) Corso di Laurea in Chimica Industriale

*VI) Piano orientato: CHIMICO FISICO-ORGANICO*

*Insegnamento* *anno*

*Insegnamenti caratterizzanti (otto)*

1	CHIMICA DEI COMPOSTI ETEROCICLICI	IV
2	CHIMICA ORGANICA APPLICATA	III
3	COMPLEMENTI DI CHIMICA FISICA	III
4	CHIMICA FISICA ORGANICA	IV
5	METODI FISICI IN CHIMICA ORGANICA	IV
6	CINETICA CHIMICA	IV
7	CHIMICA ORGANICA SUPERIORE	V
8	SPETTROSCOPIA MOLECOLARE	V

*Insegnamenti consigliati (tre su sette)*

1	ESERCITAZIONI FISICA SPERIMENTALE	II
2	STRUTTURISTICA CHIMICA	III

3	ESERCITAZIONI DI TECNICA E SINTESI SPECIALI ORG.	IV
4	ELETTROCHIMICA ORGANICA CON ESERCITAZIONI	IV
5	CHIMICA MACROMOLECOLARE	V
6	CHIMICA DEI COMPOSTI ELEMENTO-ORGANICI	IV/V
7	CHIMICA BIOORGANICA (Corso Libero Pareggiato)	IV/V

*VII) Piano orientato: ORGANICO DI SINTESI*

*Insegnamento* *anno*

*Insegnamenti caratterizzanti (sette)*

1	CHIMICA DEI COMPOSTI ETEROCICLICI	IV
2	CHIMICA ORGANICA APPLICATA	III
3	METODI FISICI IN CHIMICA ORGANICA	IV
4	CHIMICA ORGANICA SUPERIORE	IV
5	CHIMICA FISICA ORGANICA	IV
6	ESERCITAZIONI DI TECNICA E SINTESI SPECIALI ORGANICHE	IV
7	COMPLEMENTI DI CHIMICA ORGANICA	V

*Insegnamenti consigliati (quattro su dieci)*

1	CHIMICA ORGANICA INDUSTRIALE (*)	III/IV
2	ELETTROCHIMICA ORGANICA CON ESERCITAZIONI	IV
3	CHIMICA INDUSTRIALE ORGANICA (*)	IV
4	CHIMICA FARMACEUTICA E TOSSICOLOGICA I o CHIMICA FARMACEUTICA E TOSSICOLOGICA II (1)	—
5	CINETICA CHIMICA	IV
6	CHIMICA DELLE FERMENTAZIONI (2)	V
7	CHIMICA DELLE SOSTANZE ORGANICHE NATURALI (3)	IV
8	CHIMICA DEI COMPOSTI ELEMENTO-ORGANICI (3)	V
9	CHIMICA MACROMOLECOLARE (3)	V

10 STEREOCHIMICA ORGANICA IV/V

(\*) Corso di Laurea in Chimica Industriale.

(<sup>1</sup>) Corso di Laurea in Farmacia.

(<sup>2</sup>) Si fa presente che questi due Corsi sono di particolare interesse per la sintesi dei "fine chemicals" (farmaci, insetticidi...).

(<sup>3</sup>) Questi 2 Corsi interessano, in particolare, la chimica dei polimeri.

VIII) Piano orientato: **BIO ORGANICO**

Insegnamento anno

*Insegnamenti caratterizzanti* (otto)

1	CHIMICA DEI COMPOSTI ETEROCICLICI	IV
2	CHIMICA ORGANICA SUPERIORE	III
3	CHIMICA ORGANICA APPLICATA	III
4	METODI FISICI IN CHIMICA ORGANICA	IV
5	CHIMICA FISICA ORGANICA	IV
6	CHIMICA DELLE SOSTANZE ORGANICHE NATURALI	IV
7	CHIMICA DELLE FERMENTAZIONI	V
8	COMPLEMENTI DI CHIMICA ORGANICA	V

*Insegnamenti consigliati* (tre su sette)

1	CHIMICA BIOLOGICA o BIOCHIMICA APPLICATA (*)	III III
2	ESERCIT. DI TECNICA E SINTESI SPECIALI ORGANICHE	IV
3	CINETICA CHIMICA	IV
4	FARMACOLOGIA (*) oppure CHIMICA FARMACEUTICA E TOSSICOLOGICA I o II (*)	V V
5	STEREOCHIMICA ORGANICA	IV/V
6	CHIMICA BIO ORGANICA (corso libero pareggiato)	IV/V
7	ELETTROCHIMICA ORGANICA CON ESERCITAZIONI	IV

(\*) Corso di Laurea in Farmacia.

IX) Piano orientato: **ANALITICO APPLICATIVO**

Insegnamento anno

*Insegnamenti caratterizzanti* (sette)

1	STRUTTURISTICA CHIMICA	III
---	------------------------	-----

2	MISURE ELETTRICHE (*)	III/IV
3	CHIMICA FISICA II	IV
4	METODI FISICI IN CHIMICA ORGANICA	IV
5	ELETTROCHIMICA	IV
6	SPETTROSCOPIA MOLECOLARE	V
7	ESERCITAZIONI DI ANALISI CHIMICA APPLICATA	IV

*Insegnamenti consigliati* (quattro su dieci)

1	MINERALOGIA CON ESERCITAZIONI PRATICHE	I
2	CHIMICA INORGANICA SUPERIORE	IV
3	CHIMICA ORGANICA SUPERIORE	IV
4	TEORIA DEGLI ELETTROLITI (*)	IV/V
5	COMPLEMENTI DI CHIMICA ORGANICA	V
6	CORROSIONE E PROTEZIONE DEI METALLI (*)	IV/V
7	CHIMICA FISICA DELLO STATO SOLIDO	V
8	CHIMICA MACROMOLECOLARE	V
9	CHIMICA FISICA DELLE INTERFASI	V
10	ELETTROCHIMICA ORGANICA CON ESERCITAZIONI	IV

(\*) Corso di Laurea in Chimica Industriale.

#### 4) NORME COMUNI A TUTTI I PIANI DI STUDIO

##### *Biennio propedeutico*

L'insegnamento di CHIMICA ORGANICA I è consigliato al II anno.

L'insegnamento di CHIMICA ORGANICA II è consigliato al III anno.

Gli insegnamenti di ANALISI MATEMATICA I e II, di GEOMETRIA I e II, di GEOMETRIA I e di MECCANICA RAZIONALE, dei corsi di Laurea in Matematica o in Fisica, possono sostituire gli insegnamenti fondamentali di ISTITUZIONI DI MATEMATICHE I e II e di ESERCITAZIONI DI MATEMATICHE I e II.

L'ammissione al corso di ESERCITAZIONI DI ANALISI CHIMICA QUALITATIVA implica la frequenza al corso di ESERCITAZIONI DI PREPARAZIONI CHIMICHE I ed il superamento dell'esame di CHIMICA GENERALE ED INORGANICA I.

L'ammissione all'esame II implica il superamento dell'esame I.

L'ammissione agli esami di CHIMICA GENERALE ED INORGANICA II e di ESERCITAZIONI DI ANALISI CHIMICA QUALITATIVA implica il superamento degli esami di ESERCITAZIONI DI PREPARAZIONI CHIMICHE I e di CHIMICA GENERALE ED INORGANICA I.

##### *Triennio di studi di applicazione*

L'ammissione al corso di ESERCITAZIONI DI CHIMICA ORGANICA E ANALISI ORGANICA implica la frequenza al corso di ESERCITAZIONI DI PREPARAZIONI CHIMICHE II e il superamento dell'esame di CHIMICA ORGANICA I.

L'ammissione all'esame II implica il superamento dell'esame I.

L'ammissione all'esame di ESERCITAZIONI DI CHIMICA FISICA I e di CHIMICA FISICA I implica il superamento degli esami di ESERCITAZIONI DI MATEMATICHE I e di ISTITUZIONI DI MATEMATICHE I.

Per essere ammesso al laboratorio di laurea lo studente deve presentare domanda di ammissione alla Segreteria Didattica, in via Venezian 21 (Vedi Regolamento Tesi).

#### **SI PRESENTANO PERTANTO AGLI STUDENTI LE SEGUENTI POSSIBILITÀ:**

- Scelta del piano di studio secondo lo Statuto (punto 1).
- Proposta di un piano di studio liberalizzato (punto 2) da sottoporre all'approvazione del Consiglio del Corso di Laurea.
- Proposta di uno dei nove piani orientati (punto 3) da sottoporre all'approvazione del Consiglio del Corso di Laurea.

Il modulo per la compilazione del piano di studio si ritira (e si consegna a compilazione avvenuta) alla Segreteria della Facoltà di Scienze, in via Celoria 20 (aperta tutti i giorni dalle 8.30 alle 11.30 escluso il sabato).

Lo studente nel compilare il modulo del Piano di Studio deve indicare:

- se sceglie un piano di studio secondo lo Statuto e l'Indirizzo del corso (organico-biologico oppure inorganico-chimico fisico);
- se sceglie un piano di studio liberalizzato e l'indirizzo del corso (organico-biologico oppure inorganico-chimico fisico);
- se sceglie un piano di studio orientato e quale dei nove
- se è la prima proposta di piano di studio o se è una modifica alla prima proposta;
- il numero progressivo degli insegnamenti che intende seguire.

Il piano di studio presentato diventa operativo ai fini della validità degli esami superati solo dopo l'approvazione del Consiglio del Corso di Laurea.

Qualora il piano di studio non fosse accettato, la Commissione Piani di Studio inviterà lo studente per concordare le modifiche.

I Piani di Studio proposti negli anni precedenti e già approvati dal Consiglio del Corso di Laurea sono ritenuti validi anche se non conformi alle norme qui espresse.

Lo studente deve presentare la prima proposta di piano di studio entro il 31 DICEMBRE DEL 1°, 2° O 3° ANNO e le eventuali modifiche entro il 31 dicembre dell'anno successivo.



## 5) TRASFERIMENTI

- In generale non è consentita l'iscrizione come "fuori corso", almeno il 5° anno deve essere svolto presso questo Corso di Laurea.
- In particolare per i trasferimenti dal Corso di Laurea in Chimica Industriale al Corso di Laurea in Chimica di questa Facoltà vengono applicate le seguenti regole:
  - \* Il piano di studio deve essere presentato contestualmente alla domanda di trasferimento.
  - \* Sono automaticamente riconosciuti gli esami sostenuti per corsi aventi la stessa denominazione.
  - \* L'esame del corso di ESERCITAZIONI DI PREPARAZIONI CHIMICHE sostenuto a Chimica Industriale è equipollente all'esame del corso di ESERCITAZIONI DI PREPARAZIONI CHIMICHE I di Chimica.
  - \* Gli esami dei corsi di COMPLEMENTI DI CHIMICA ORGANICA e di ESERCITAZIONI DI CHIMICA INDUSTRIALE ORGANICA di Chimica Industriale, sono globalmente equipollenti agli esami di ESERCITAZIONI DI PREPARAZIONI CHIMICHE II ed ESERCITAZIONI DI CHIMICA ORGANICA E ANALISI CHIMICA di Chimica.

### AVVERTENZA

Nell'Anno Accademico 1991-92 viene attivato anche il SECONDO ANNO del Corso di Laurea in Chimica secondo il Nuovo Ordinamento.

## REGOLAMENTO PER LO SVOLGIMENTO DELLE TESI DI LAUREA IN CHIMICA

### 1. CONDIZIONI PER L'AMMISSIONE

Per essere ammesso al laboratorio di tesi lo studente deve avere frequentato tutti i corsi di laboratorio, superato almeno 25 esami previsti dal Piano di Studio e tutti gli esami fondamentali del Biennio, nonché Chimica Organica II. Nel caso che un laboratorio sia stato frequentato, ma che il relativo esame non sia stato sostenuto, si richiede una dichiarazione di frequenza rilasciata dal Docente titolare dell'insegnamento.

### 2. DURATA DEL PERIODO DI TESI

Lo studente non è ammesso a sostenere l'Esame di Laurea prima che sia trascorso un Anno Solare dalla data di ammissione in tesi.

### 3. FREQUENZA

L'orario di frequenza al laboratorio di tesi viene concordato con il Relatore tenendo conto del tipo di ricerca e degli impegni didattici dello studente.

### 4. TIPOLOGIA DELLE TESI

Le tesi di Laurea si distinguono in Tesi Sperimentali Interne, Tesi Sperimentali Esterne, Tesi Compilative.

#### 4.1 - Tesi sperimentali

La Tesi Sperimentale consiste in una dissertazione scritta sulle ricerche originali compiute dallo studente, nel laboratorio preciso nella domanda di ammissione in tesi, sotto la guida del Relatore e del Correlatore ivi indicati.

#### 4.1.a - Tesi Sperimentali Interne

Sono considerate Tesi Sperimentali Interne quelle che si svolgono presso i Dipartimenti di: Chimica Fisica ed Elettrochimica, Chimica Inorganica e Metallorganica, Chimica Organica e Industriale, e presso l'Istituto di Chimica Strutturistica Inorganica dell'Università di Milano.

Possono essere *Relatori* tutti i Docenti Ufficiali del Corso di Laurea in Chimica, i Docenti Ufficiali di materie chimiche di altri Corsi di Laurea afferenti ai suddetti Dipartimenti e Istituti Chimici, gli Assistenti e i Ricercatori Confermati. Possono essere *Correlatori* tutti i laureati cultori di materie chimiche, ufficialmente strutturati nei Dipartimenti e Istituti Chimici suddetti.

#### 4.1.b - Tesi Sperimentali Esterne

Sono considerate Tesi Sperimentali Esterne quelle che si svolgono presso altri Dipartimenti ed Istituti di Università Italiane, presso Istituti Superiori e Laboratori di Ricerca di Enti Pubblici.

Possono essere *Relatori* tutti i Docenti Ufficiali del Corso di Laurea in Chimica. Possono essere *Correlatori* tutti i laureati cultori di materie chimiche attinenti alla tematica di tesi e dipendenti dall'Ente presso il quale viene svolta la ricerca. **ALMENO UN MESE PRIMA DELL'ESAME DI LAUREA IL LAUREANDO ILLUSTRERÀ LE CONCLUSIONI DELLE SUE RICERCHE IN UN SEMINARIO PUBBLICO, ALLA PRESENZA DEL RELATORE E DI 5**

DOCENTI UFFICIALI DEL CORSO DI LAUREA IN CHIMICA NOMINATI DAL PRESIDENTE DEL CONSIGLIO DI CORSO DI LAUREA.

#### 4.2 - Tesi Compilative

La Tesi Compilativa consiste in una dissertazione scritta di carattere critico sulle ricerche bibliografiche compiute dallo studente su un argomento chimico, precisato nella domanda di ammissione in tesi, sotto la guida del Relatore e del Correlatore ivi indicati.

Possono essere *Relatori* tutti i Docenti Ufficiali del Corso di Laurea in Chimica, i Docenti Ufficiali di materie chimiche di altri Corsi di Laurea afferenti ai Dipartimenti e Istituti Chimici suddetti, gli Assistenti e i Ricercatori Confermati. Possono essere *Correlatori* tutti i laureati cultori di materie chimiche, ufficialmente strutturati nei Dipartimenti e Istituti Chimici suddetti.

ALMENO UN MESE PRIMA DELL'ESAME DI LAUREA IL LAUREANDO ILLUSTRERÀ LE CONCLUSIONI DEL SUO STUDIO CRITICO SULLE RICERCHE BIBLIOGRAFICHE SVOLTE IN UN SEMINARIO PUBBLICO ALLA PRESENZA DEL RELATORE, DEL CORRELATORE E DI 5 DOCENTI UFFICIALI DEL CORSO DI LAUREA IN CHIMICA NOMINATI DAL PRESIDENTE DEL CONSIGLIO DEL CORSO DI LAUREA.

#### 5. DOMANDE DI AMMISSIONE IN TESI (\*)

##### 5.1.a - Tesi Sperimentali Interne

Lo studente che intende svolgere una Tesi Sperimentale Interna deve presentare alla Segreteria Didattica entro i termini precisati al punto 7 la domanda di ammissione in tesi sottoscritta dal Relatore e/o dal Correlatore, indicando il Dipartimento o l'Istituto presso cui intende svolgere la tesi e l'argomento della ricerca.

L'elenco delle tematiche di ricerca sviluppate nei laboratori è contenuto nelle pagine finali del presente libretto.

##### 5.1.b - Tesi Sperimentali Esterne

Lo studente che intende svolgere una Tesi Sperimentale Esterna deve presentare alla Segreteria Didattica entro i termini precisati al punto 7 la domanda di ammissione in tesi, sottoscritta dal Relatore e dal Correlatore, indicando l'Ente presso cui intende svolgere la tesi e l'argomento della ricerca.

Alla domanda vanno allegati:

- la motivazione della richiesta di svolgimento di tesi esterna
- il programma dettagliato delle ricerche firmato dal Relatore e dal Correlatore
- una dichiarazione firmata dal Direttore dell'Ente presso il quale viene svolta la tesi che attesti: la disponibilità ad ospitare il laureando, a concedergli l'uso delle attrezzature, a garantire la copertura finanziaria della ricerca, a garantire la copertura assicurativa del laureando.

In mancanza di quest'ultima, deve essere inoltrata al Rettore dell'Università di Milano una richiesta di estensione della copertura assicurativa dell'Università, indicando luogo e periodo in cui viene compiuta la ricerca. Copia di tale richiesta deve essere allegata alla domanda di ammissione in tesi.

Il Consiglio di Corso di Laurea valuta la richiesta dello studente accertando la validità delle motivazioni e l'impossibilità di svolgere lo stesso argomento, o un argomento affine, presso i Dipartimenti o l'Istituto citati al punto 4.1.a.

#### 5.2 - Tesi Compilative

Lo studente che intenda svolgere una Tesi Compilativa deve presentare alla Segreteria Didattica la domanda di ammissione in tesi, sottoscritta dal Relatore e/o dal Correlatore, indicando l'argomento della ricerca bibliografica che intende svolgere.

#### 6. CASI PARTICOLARI

Casi particolari potranno essere considerati dal Conasiglio nel Corso di Laurea.

#### 7. DATE DELLE SEDUTE DI LAUREA E DEGLI INGRESSI IN TESI PER IL 1992

	LAUREE Sedute	INGRESSI IN TESI Date Ingressi	Presentazione delle domande
III Sessione 1990-91	27-28 Febbraio	1° Febbraio	1-31 Gennaio
I Sessione 1991-92	28-29 Maggio 9-10 Luglio	2 Maggio 1° Luglio	1-30 Aprile 1-30 Giugno
II Sessione 1991-92	3-4 Novembre	2 Novembre	1-31 Ottobre

## CALENDARIO LEZIONI ED ESAMI A.A. 1991-92

### NUOVO ORDINAMENTO

#### Primo Anno

##### *Lezioni*

1° Semestre            7 ottobre 1991 - 18 gennaio 1992  
2° Semestre            2 marzo 1992 - 12 giugno 1992

##### *Esami*

1ª Sessione            1 appello a gennaio 1992  
                              2 appelli a febbraio 1992  
2ª Sessione            1 appello a giugno 1992  
                              2 appelli a luglio 1992  
3ª Sessione            2 appelli a settembre 1992

#### Secondo Anno

##### *Lezioni*

1° Semestre            23 settembre 1991 - 20 dicembre 1991  
2° Semestre            2 marzo 1992 - 12 giugno 1992

##### *Esami*

1ª Sessione            2 appelli a gennaio 1992  
                              2 appelli a febbraio 1992  
2ª Sessione            1 appello a giugno 1992  
                              2 appelli a luglio 1992  
3ª Sessione            1 appello a settembre 1992

### VECCHIO ORDINAMENTO

#### Terzo, Quarto e Quinto Anno

##### *Lezioni*

1° Semestre            7 ottobre 1991 - 18 gennaio 1992  
2° Semestre            2 marzo 1992 - 12 giugno 1992

## PROGRAMMI DEGLI INSEGNAMENTI CORSO DI LAUREA IN CHIMICA

**Nota:** Per gli insegnamenti del 1° e 2° anno sono riportati i programmi vigenti nell'ambito del Nuovo Ordinamento. Per gli insegnamenti del 3°, 4° e 5° anno i programmi si riferiscono al Vecchio Ordinamento.

## NUOVO ORDINAMENTO

### 1. CHIMICA GENERALE E INORGANICA

PROF. SERGIO CENINI

#### *Atomi e loro struttura*

Individui chimici e miscele. Particelle elementari presenti nell'atomo. Isotopi, simboli degli elementi, pesi atomici relativi e assoluti. Difetto di massa. Primi modelli atomici. La quantizzazione dell'energia. Teoria di Bohr per l'atomo di idrogeno. Introduzione alla meccanica quantistica. L'atomo di idrogeno. Rappresentazione grafica degli orbitali. Rappresentazione grafica della densità elettronica radiale. La degenerazione orbitale. Classificazione degli orbitali e numeri quantici. I sistemi idrogenoidi, espressione analitica dell'equazione d'onda di Schrödinger e interpretazione di  $\psi$  come nuvola di carica. Livelli energetici degli atomi polielettronici. Principio di esclusione di Pauli e regola di Hund.

#### *Il sistema periodico degli elementi*

Occupazione degli orbitali col crescere del numero di elettroni. La tavola periodica degli elementi. Energia di ionizzazione ed elettroni di valenza. Affinità elettronica.

#### *Il legame chimico*

Il legame ionico. Il legame covalente. Strutture di Lewis. Il legame dativo. Elettronegatività. Mesomeria e risonanza. Legame coordinativo e principio di elettroneutralità. Legame di idrogeno. Forze di van der Waals e altre interazioni elettrostatiche. Legame covalente e geometria molecolare. Orbitali ibridi. Orbitali molecolari. La molecola  $H_2$ . Regole di combinazione degli OA per costruire gli OM. Molecole biatomiche omonucleari. Molecole biatomiche eteronucleari. OM localizzati. OM delocalizzati. Legami tricentrici. Legame chimico nei metalli. Isolanti e semiconduttori.

#### *Lo stato solido*

Raggi atomici. Cristalli molecolari. Cristalli ionici. Altre strutture cristalline.

#### *La materia allo stato gassoso*

La pressione. Leggi dei gas. Teoria cinetica dei gas. Comportamento dei gas reali.

#### *Termodinamica chimica*

Sistemi e funzioni di stato. Lavoro e calore. Energia interna e primo principio della termodinamica. Calore di reazione e entalpia, condizioni standard e entalpia. Condizioni standard e entalpie di varie trasformazioni. Termochimica. Energia di legame e calore di reazione. Tendenza a reagire di un sistema. Entropia e secondo principio della termodinamica. Terzo principio della termodi-

namica. Energia libera. Energia libera e costante di equilibrio. Dipendenza della costante di equilibrio della temperatura. Dipendenza dalla temperatura di  $\Delta H$ ,  $\Delta S$  e  $\Delta G$ .

#### *Diagrammi di stato. Stato liquido e soluzioni*

Regola delle fasi e proprietà fisiche dei liquidi. Tensione di vapore delle soluzioni e leggi di Raoult. Punto di ebollizione e punto di congelamento di una soluzione. Soluzioni ideali di due componenti volatili. La distillazione. Soluzioni non ideali. Soluzioni sature, solubilità. La pressione osmotica. Ripartizione di un soluto tra solventi immiscibili e solubilità dei gas nei liquidi. Lo stato colloidale. Coefficienti di attività.

#### *Velocità di reazione*

Ordine di reazione. Determinazione sperimentale dell'ordine di reazione. Processi elementari e meccanismo di reazione. Teoria della collisione e energia di attivazione. Dipendenza della velocità di reazione dalla temperatura. Reazioni fotochimiche e reazioni di ordine frazionario. Velocità di reazione e equilibrio chimico. Reazioni in soluzione. I catalizzatori.

#### *Acidi e basi*

Teoria di Arrhenius degli acidi e delle basi. Acidi e basi secondo Brønsted e Lewis. Forza degli acidi e delle basi. Prodotto ionico dell'acqua e pH. Acidi di basi deboli. Idrolisi, soluzioni tampone. Gli indicatori. Titolazioni acidometriche. Equilibri di dissociazione a più stadi.

#### *Elettrochimica*

Conducibilità elettrica delle soluzioni acquose. Conducibilità molare. Proprietà delle soluzioni e coefficienti di Van't Hoff. Energia libera e lavoro elettrico. Le pile. Potenziali di ossido-riduzione. Impiego dei potenziali normali. Potenziali di ossido-riduzione variabile col pH. Potenziali di ossido-riduzione degli ioni complessi. Inversione della pila. Ille di concentrazione. Titolazioni potenziometriche. Misure potenziometriche del pH. L'elettrolisi. Prodotti dell'elettrolisi. Sovratensione. Leggi dell'elettrolisi. Processi elettrolitici industriali. Pile di pratico impiego.

#### *Composti di coordinazione*

Sguardo storico. Il legame coordinativo. Primi sviluppi. Teoria del legame di valenza. Teoria del campo cristallino. Teoria del campo dei leganti. Teoria degli orbitali molecolari. Leganti polidentati e chelanti. Applicazioni dei complessi in chimica analitica. Leganti a ponte. Carbonilmetalli e cianometallati. Complessi  $\pi$ . Composti di coordinazione e catalisi omogenea. Isomeria nei composti di coordinazione.

#### *Radioattività e chimica nucleare*

Stabilità nucleare e radioattività. Radiazioni  $\alpha$ ,  $\beta^-$ , e  $\gamma$ . Riconoscimento e misura della radioattività. Nuclidi radioattivi e famiglie radioattive naturali. Reazioni nucleari e radioattività artificiale. Impiego degli atomi radioattivi, prodotti artificialmente. Fissione nucleare. Fusione nucleare. Elementi transuranici.

### *Chimica Inorganica*

Proprietà periodiche. Gli ossidi e gli idruri. Idrogeno e ossigeno. I gas nobili. Gruppo VII B degli alogeni. Gruppo VI B dei calcogeni: lo zolfo. Gruppo V B dell'azoto. Gruppo IV B del carbonio. Gruppo III del boro: boro e alluminio. Contrazione lananoidea. Gruppo I A dei metalli alcalini. Sottogruppo I B del rame: rame, cenni a argento e oro. Gruppo II A del berillo. Sottogruppo II B dello zinco. Il cromo. Il manganese (nelle sue applicazioni analitiche). Il ferro.

#### *Testi consigliati*

L. Malatesta, S. Cenini, *Principi di Chimica Generale con esercizi*. Casa Editrice Ambrosiana - Milano (1989).  
L. Malatesta, *Chimica Inorganica*, L.G. Guadagni, 1979.

## **2. LABORATORIO DI CHIMICA GENERALE E INORGANICA**

PROF. FRANCESCA PORTA IN ALICANTE  
PROF. ALESSANDRO CERIOTTI

Cenni su: unità di misura, errore assoluto e relativo, cifre significative ed arrotondamento.

Pesi atomici relativi ed assoluti. Peso molecolare. Mole e peso molare. Formula minima e molecolare dei composti chimici. Calcolo della percentuale degli elementi nei composti e calcolo della formula minima. Calcoli molari e rapporti ponderali.

Numeri di ossidazione dei composti inorganici ed organici. Tipi di reazioni chimiche e calcolo dei coefficienti di reazione. Reazioni acido-base. Reazioni di ossido-riduzione.

Calcoli stechiometrici in reazioni chimiche e rendimento di una reazione. Equivalenti acidimetrici ed ossidimetrici. Peso equivalente.

Modi di esprimere la concentrazione di una soluzione e calcoli relativi.

Analisi gravimetrica. Analisi volumetrica: titolazioni acidobase ed ossidimetriche.

Leggi dei gas ideali e di miscele di gas ideali. Densità e peso molecolare medio. Riepilogo di calcoli stechiometrici estesi a situazioni che coinvolgono solidi, liquidi, soluzioni e gas.

Solubilità dei gas nei liquidi.

Proprietà colligative delle soluzioni. Tensione di vapore. Legge di Raoult. Ebulioscopia, crioscopia. Pressione osmotica.

Cenni di termodinamica: legge di Hess. Variazione delle funzioni di stato  $\Delta H$ ,  $\Delta G$ ,  $\Delta S$  nelle reazioni chimiche. Entalpie di formazione e di combustione.

Principi generali dell'equilibrio chimico. Costante di equilibrio e variazione della stessa al variare della temperatura. Principio di Le Chatelier: ed influenza della temperatura, pressione e concentrazione sul raggiungimento dell'equilibrio.

Equilibrio in fase omogenea ed eterogenea.

Equilibri ionici in soluzione acquosa. dissociazione elettrolitica, elettroliti forti e deboli. Prodotto ionico dell'acqua e pH.

Acidi (e basi) secondo Arrhenius e secondo Brønsted.

Acidi (e basi) monoprotici e poliprotici. Miscele di acidi

Idrolisi e soluzioni tampone. Curve di titolazione ed indicatori.

Ioni complessi.

Solubilità e prodotto di solubilità.

Elettrochimica. Leggi di Faraday. Potenziali di ossido-riduzione. Legge di Nerst.

Inoltre, ad integrazione dell'esercitazioni numeriche, vengono effettuate esercitazioni pratiche (8 ore settimanali) in laboratorio.

Tali esercitazioni vertono sull'acquisizione delle tecniche di base (separazione, purificazione, conservazione dei prodotti) e sulla sintesi di semplici composti inorganici, organometallici ed organici.

Inoltre vengono effettuate determinazioni chimico-fisiche di pesi molecolari, di solubilità e curve di titolazione per piaccammetria e potenziometria.

#### *Testi consigliati*

M. Freni, A. Sacco, *Stechiometria*, ed. L.G. Guadagni (Milano).

J.L. Rosenberg, *Teoria ed Applicazioni di Chimica Generale*, collana Schaum, ed. Etas-Libri (Milano).

P.E. Goldberg, *Schaum's 3000 Solved Problems in Chemistry*, ediz. McGraw-Hill Book Co.

Programma svolto nell'a.a. 89/90

## **3. ISTITUZIONI DI MATEMATICHE (1° corso)**

PROF. STEFANIA DE STEFANO

*Campi numerici*: numeri razionali e numeri reali. Completezza del campo dei numeri reali. Estremo superiore ed inferiore. Il campo dei numeri complessi. forma algebrica e forma trigonometrica dei numeri complessi. Il piano di Argand-Gauss. Radici di un numero complesso. Il teorema fondamentale dell'algebra.

*Richiami sulle funzioni elementari*: polinomi in una variabile, funzioni trigonometriche e loro inverse, esponenziale, logaritmo, funzioni iperboliche e loro inverse. Potenze del binomio. I numeri  $n! \approx \left(\frac{n}{e}\right)^n$ . Potenze ad esponente razionale e reale.

*Insiemi e operazioni fondamentali sugli insiemi*: unione, intersezione, complemento di un insieme. Definizione astratta di funzioni, immagine e controimmagine, grafico. Funzioni suriettive, iniettive e biiettive. Funzioni monotone. Funzioni pari e dispari. Funzioni periodiche.

Sfere in  $\mathbb{R}^n$ . Punti interni di un sottoinsieme, insiemi aperti, insiemi chiusi e limitati.

*Definizione e principali proprietà delle funzioni continue a valori reali:* teorema della permanenza del segno, teorema dell'esistenza degli zeri, teorema dell'esistenza dei valori intermedi, teorema di esistenza del massimo e del minimo. Definizione di limite, equivalenza fra continuità ed esistenza del limite finito. Esempi di funzioni continue. Controesempi, tipi di discontinuità delle funzioni di una variabile reale.

*Tasso d'incremento di una funzione reale di una variabile reale, derivata, retta tangente al grafico di una funzione.* Regole di derivazione di somma, prodotto e inverse di funzioni. Derivata della funzione inversa e regola di derivazione delle funzioni composte. Calcolo di derivate. Massimi e minimi relativi. Teorema dell'annullamento di  $f'$  negli estremi. Teorema di Lagrange o della media per le derivate. Crescere e decrescere di una funzione, concavità e convessità, studi di funzione. Teorema dell'Hôpital. Applicazione allo studio delle forme di indecisione.

*Teorema della continuità uniforme.* Integrazione delle funzioni continue di una variabile reale. Principali proprietà dell'integrale: linearità, additività rispetto all'insieme di integrazione. Teorema del confronto, teorema della media per gli integrali. Primo e secondo teorema fondamentale del calcolo. Primitive di funzioni continue. Integrazione per parti e per sostituzione. Calcolo di integrali.

*Successioni.* Limiti di successioni, criterio di convergenza di Cauchy. Serie. Convergenza semplice ed assoluta. Esempi: serie armonica e geometrica. Criteri sufficienti per la convergenza assoluta: confronto, radice, rapporto. Criterio di Leibnitz per le serie a segno alterno.

*Integrali impropri di prima e seconda specie.* Confronto di una serie con un integrale improprio.

*Successioni e serie di funzioni:* definizione, limiti, convergenza uniforme. Serie di Taylor. Esempi. Resto. Il concetto di "o". Applicazioni al calcolo dei limiti. Serie di Fourier. Esempi. Cenni alla trasformata di Fourier.

*Testi ed esercizi suggeriti*  
Marcellini-Sbordone: *Istituzioni di Matematica ed applicazioni* - Ed. Liguori, Napoli.

Lax-Burnstein-Lax: *Analisi Matematica con applicazioni e calcolo numerico* - Ed. Zanichelli, Bologna.

Apostol: *Calcolo*, vol. I - Ed. Boringhieri.

A. Squellari-Marinoni: *Esercizi svolti di Matematica Generale* - Ed. Unicopli, Milano.

L. de Biase, R. Fumagalli, C. Zanco: *Esercizi e complementi di Analisi Matematica* - Ed. Giappicelli, Torino.

Programma svolto nell'a.a. 85/90

#### 4. FISICA GENERALE (1° corso) PROF. MICHELANGELO FAZIO

##### A. MECCANICA

###### 1. Grandezze, unità, campioni, dimensioni

Grandezze fisiche, unità di misura - Campioni e loro requisiti - Il Sistema Internazionale - Dimensioni di una grandezza: criterio di omogeneità e controllo dimensionale - Criteri di scelta di terne dimensionalmente coerenti e metodo del determinante.

###### 2. Vettori

Grandezze scalari e vettoriali - Algebra vettoriale: somma, differenza, componenti, versori, prodotto scalare e vettoriale - Regola della mano destra.

###### 3. Teoria degli errori

Errori sistematici e casuali - Accuratezza e precisione di una misura - Valor medio - Errore assoluto, relativo, percentuale - Deviazione standard - Precisione percentuale - Curva di Gauss - Propagazione degli errori e calcolo degli errori di grandezza misurate indirettamente - Errore più probabile.

###### 4. Cinematica

Punto materiale: vettori posizione e spostamento - Legge oraria del moto - Equazioni parametriche - Equazione della traiettoria - Velocità media e istantanea - Accelerazione media e istantanea - Moto rettilineo uniforme, uniformemente accelerato, vario, curvilineo, circolare, armonico semplice: leggi orarie e studio grafico - Moto dei gravi: gittata, altezza massima - Forma vettoriale dell'accelerazione nei moti curvilinei: accelerazione centripeta e tangenziale e loro origine - Grandezze cinematiche rotazionali e relative unità di misura.

###### 5. Dinamica del punto

Massa inerziale - Forza - Principio di inerzia - Legge fondamentale della dinamica - Principio di azione e reazione: punto di applicazione; reazioni centrifughe e forze centripete - Metodi di misura di masse e forze - Bilance e dinamometri - Elasticità e legge di Hooke - Forze di attrito - Pendolo semplice.

###### 6. Meccanica relativa

Sistemi di riferimento inerziali e non inerziali - Velocità e accelerazioni assolute, relative e di trascinamento - Analisi di moti relativi - Teorema di Coriolis e conseguenze sulle osservazioni terrestri.

###### 7. Centro di massa e quantità di moto

Centro di massa - Baricentro - Moto del centro di massa e principi di conservazione - La II legge di Newton per sistemi a massa variabile - Quantità di moto e

relativo principio di conservazione - Impulso e forze impulsive - Urti e loro classificazione geometrica.

### 8. Energetica

Lavoro di una forza costante e variabile - Lavoro come area - Energia cinetica e relativo teorema - Forze posizionali o conservative: metodi di riconoscimento - Energia potenziale e campi conservativi - Energia potenziale di gravità - Energia elastica - Principio di conservazione dell'energia - Forze dissipative ed estensione del teorema di conservazione dell'energia - Potenza - Equilibrio del punto materiale dal punto di vista energetico - Classificazione energetica degli urti - Moto di un sistema massa-molla - Energia nel moto armonico - Molle in serie e in parallelo.

### 9. Dinamica dei corpi rigidi

Corpo rigido - Sistemi discreti e continui - Moto traslatorio e rotatorio - Moti assiali e polari - Momento meccanico - Momento angolare e momento d'inerzia per punti materiali e per corpi estesi - Teorema di Huygens-Steiner - Relazione tra momento angolare e momento d'inerzia - Equazione cardinale della dinamica dei corpi rigidi - Sistemi isolati meccanicamente e loro condizioni di equilibrio - Conservazione del momento angolare - Urti con conseguenze rotatorie - Lavoro e potenza nei moti rotatori.

### 10. Meccanica dei fluidi

Fluido perfetto - Concetto di pressione - Legge di comprimibilità - Legge di viscosità - Omogeneità e incomprimibilità - Regime stazionario: equazione di continuità, portata di massa e di volume - Teorema di Bernoulli e pressione dinamica - Legge di Torricelli - Principio di isotropia - Principio di Pascal - Principio di Stevino - Principio di Archimede: equilibrio dei galleggianti - Cenni sui regimi macro- e microvorticoso.

## B. TERMODINAMICA

### 1. Calore e temperatura

Concetto di calore - Temperatura - Definizione calorimetrica del calore - Fonti di calore - Conduttori e isolanti - Equilibrio termico - Scala Celsius, Fahrenheit e Kelvin - Dilatazione termica - Termometri - Relazione fondamentale della termologia - Capacità termica - Sorgenti di calore - Equivalenza calore - Lavoro: il joule e la caloria; mulinello di Joule - Propagazione del calore - Legge di Fourier - Calorimetri e termos - Equilibrio termico di miscugli - I gas perfetti e le loro leggi - Zero assoluto - Cambiamenti di stato: calori latenti e scambi di calore.

### 2. Teoria cinetica

Modello di gas perfetto - Legge di Joule-Clausius - Velocità quadratica media - Energia interna di un gas perfetto - Energia traslazionale e rotazionale - Gradi di libertà: principio di equipartizione - Distribuzione della velocità: Maxwelliana; velocità più probabile.

### 3. Primo principio della termodinamica

Trasformazioni aperte e cicli - Equazioni di stato e funzioni di stato: coordinate rappresentative macroscopiche - Equilibrio termodinamico - Carattere di una trasformazione: reversibilità e irreversibilità - Tracce nell'ambiente esterno - Lavoro di espansione - Le più importanti trasformazioni termodinamiche - Primo principio per sistemi qualsiasi e per gas perfetti - Energia interna - Energia interna di un gas perfetto: l'espansione libera di Joule - Identificazione dell'energia interna della teoria cinetica con quella termodinamica - Calori specifici molari dei gas perfetti: relazione di Mayer ed equipartizione dell'energia - Politropiche e relativi calori specifici - Equazioni di Poisson - Il lavoro adiabatico come funzione di stato - Calcoli di scambi di calore e di lavori nelle varie trasformazioni.

### 4. Secondo principio della termodinamica

Trasformazioni calore-lavoro - Cicli termodinamici e loro rappresentazione nel piano (p,V) - Macchine termiche e frigorifere - Il secondo principio di Kelvin-Planck - Il secondo principio di Clausius - Il secondo principio e la irreversibilità - Rendimento e fattore di qualità e relativa relazione - Concetto di macchina operante tra due sorgenti - Il ciclo di Carnot e il suo rendimento - Teorema di Carnot per cicli termici e frigoriferi - Irraggiungibilità dello zero assoluto: nuova forma del secondo principio - Attendibilità di un ciclo termodinamico.

### 5. Entropia

Disuguaglianza di Clausius - Integrali di Clausius - Attendibilità di un ciclo e teorema di Carnot - Entropia - Variazioni di entropia nelle varie trasformazioni - Entropia e reversibilità - Entropia e lavoro - Entropia e disordine - Entropia dell'universo: l'enunciato di Clausius - Variazioni di entropia di sistema, ambiente e universo in trasformazioni aperte e cicli reversibili e irreversibili - Criteri di scelta di coordinate rappresentative - Il piano di Gibbs e le rappresentazioni in esso - Ciclo di Carnot nel piano di Gibbs - La costante dell'entropia.

## 5. LABORATORIO DI CHIMICA ANALITICA (1° corso)

PROF. UGO SARTORELLI

Obiettivo dell'insegnamento è quello di preparare lo studente ad eseguire un'analisi qualitativa inorganica.

Durante le 25 ore di lezione:

- verrà descritto il comportamento, in soluzione, dei cationi e degli anioni più comuni, secondo il seguente schema: stabilità in funzione del pH; solubilità dei loro composti; formazione di complessi; reazioni di ossidoriduzione;
- verranno suddivisi i cationi in sei gruppi analitici e gli anioni in base alla solubilità di alcuni loro sali;
- verranno discussi gli schemi proposti per il riconoscimento dei cationi e degli anioni.

Durante le 50 ore di esercitazioni in laboratorio: verranno eseguite analisi di singoli composti inorganici o di miscele.

#### *Tesi consigliati*

G. Charlot, *Analisi Chimica Qualitativa, Equilibri in soluzione*, Editore Piccin, Padova.

F.P. Treadwell, *Chimica Analitica, Volume I: Analisi Qualitativa*, Editore Vallecchi, Milano.

A.I. Vogel, *Macro and semimicro qualitative inorganic analysis*, Editore Longmans, London.

## 5. ISTITUZIONI DI MATEMATICHE (2° corso)

PROF. VERDI

Programma d'esame

#### *Insiemi di punti in uno spazio ad n-dimensioni*

Punti interni, esterni, di frontiera, di accumulazione, isolati. Insiemi aperti, chiusi, limitati, connessi, semplicemente connessi, convessi.

#### *Calcolo differenziale per le funzioni di più variabili reali*

Definizione di funzione, insieme di definizione, limiti e continuità. Derivate direzionali, derivate parziali, derivate successive. Differenziabilità, proprietà delle funzioni differenziali. Differenziali successivi. Formule di Taylor e di McLaurin. Punti estremi.

#### *Funzioni implicite*

Generalità. Teorema del Dini, massimi e minimi, sviluppo in serie.

#### *Integrazione delle funzioni reali di più variabili reali*

Curve regolari e generalmente regolari, curve rettificabili, lunghezza di una curva. Integrali lungo una linea, proprietà. Forme differenziali, differenziali esatti. Integrali di campo piano, proprietà. Legame fra integrali curvilinei e integrali di campo: teorema di Green e di Gauss.

#### *Equazioni differenziali ordinarie del primo ordine*

Teoremi di esistenza e di unicità. Integrali particolari, singolari, integrale generale. Integrazione di alcuni tipi di equazioni differenziali: equazioni differenziali esatte, a variabili separate, a variabili separabili, del tipo  $y = f(ax, by)$ , lineari, omogenee, di Bernoulli. Ricerca del fattore integrante. Integrazione di alcuni tipi di equazioni differenziali del primo ordine in forma non normale.

#### *Equazioni differenziali ordinarie di ordine superiore*

Teoremi di esistenza ed unicità. Equazioni differenziali lineari omogenee e non omogenee e coefficienti costanti e non costanti; integrale generale, Wron-

kiano, teorema di Liouville. Integrazione delle equazioni differenziali lineari omogenee e non a coefficienti costanti.

#### *Testi consigliati*

Zwirner, *Lezioni di analisi matematica*, vol. II, CEDAM.

Smirnov, *Corso di matematica superiore I e II*, Editori Riuniti.

## 6. CHIMICA ORGANICA (1° corso)

PROF. GIOVANNI RUSSO

### *STRUTTURA E LEGAME NELLE MOLECOLE ORGANICHE*

Legami ionici e covalenti. Strutture di Lewis. Strutture di risonanza. Orbitali atomici. Sovrapposizione di orbitali atomici: orbitali molecolari. Orbitali ibridi. Composizione, struttura e formule delle molecole organiche.

### *GRUPPI FUNZIONALI E CLASSIFICAZIONE DEI COMPOSITI ORGANICI*

#### *ALCANI*

Alcani lineari e ramificati. Nomenclatura degli alcani. Proprietà fisiche. Isomeria conformazionale. Richiami di cinetica e termodinamica. Reazioni degli alcani: pirolisi, combustione, alogenazione radicalica. Cicloalcani (Aspetti strutturali e conformazionali).

#### *STEREOISOMERIA*

Chiralità. Attività ottica. Enantiometria. Configurazione assoluta. Diastereoisomeri. Stereochimica nelle reazioni organiche

#### *ALOGENOALCANI*

Nomenclatura. Proprietà fisiche. Sostituzione nucleofila  $S_N2$ ,  $S_N1$ . Eliminazione  $E_2$  ed  $E_1$ . Meccanismo, stereochimica, effetti della struttura del gruppo uscente, del nucleofilo, del substrato, del solvente. Stabilità dei carbocationi.

#### *ALCOOLI*

Struttura, nomenclatura e proprietà fisiche. Acidità e basicità. Sintesi. Reagenti organometallici. Reazioni degli alcoli, carbocationi, trasposizioni dei carbocationi, esterificazioni, ossidazioni. Eteri: sintesi e reazioni. Clidi e solfuri.

#### *ALCHENI*

Struttura, nomenclatura e proprietà fisiche. Stabilità relative degli alcheni. Sintesi degli alcheni da alogenuri, esteri solfonici e alcoli. Reazioni degli alcheni: idrogenazione catalitica, addizioni elettrofile, idroboraziche. Addizioni radicaliche. Ossidazioni. Dimerizzazione, oligomerizzazione e polimerizzazione.

#### *ALCHINI*

Struttura, nomenclatura. Stabilità del triplo legame. Preparazioni degli alchini. Reazioni degli alchini.



### SISTEMI DELOCALIZZATI

Sistema allilico: struttura e reattività. Dieni coniugati. Cicloaddizioni. Polimerizzazioni dei dieni coniugati.

### ALDEIDI E CHETONI

Struttura del gruppo carbonilico. Nomenclatura e proprietà fisiche. Preparazioni. Addizioni al carbonile: somma di acqua, alcoli, composti azotati, derivati con carbonio nucleofilo. Ossidazioni e riduzioni. Acidità degli idrogeni in  $\alpha$ : anioni enolato. Tautomeria cheto-enolica. Condensazione aldolica. Aldeidi e chetoni  $\alpha$ ,  $\beta$ -insaturi: preparazione e reattività. Addizioni 1,4 dei composti carbonilici  $\alpha$ ,  $\beta$ -insaturi.

### ACIDI CARBOSSILICI

Nomenclatura. Proprietà fisiche. Acidità e basicità. Sintesi. Reazioni del gruppo carbossilico: sostituzione nucleofila acilica mediante addizione-eliminazione. Trasformazione in alogenuri acilici, anidridi, esteri, ammidi. Reazioni di attacco nucleofilo (reagenti organometallici e idruri metallici). Reazioni della posizione  $\alpha$ . Decarbossilazione. Gli acidi carbossilici in Natura: acidi grassi, saponi, detergenti, lipidi.

### DERIVATI DEGLI ACIDI CARBOSSILICI

Alogenuri acilici. Anidridi. Esteri. Ammidi. Nitril. Cheteni-Tioesteri. Xantogenati.

### COMPOSTI BIFUNZIONALI

Nomenclatura. Composti  $\alpha$ -dicarbonilici. Composti  $\beta$ -dicarbonilici. Sintesi, acidità e uso come intermedi della sintesi.

### COMPOSTI DELLO ZOLFO E DEL FOSFORO

Struttura e nomenclatura.

### COMPOSTI AROMATICI

Benzene. Struttura elettronica e aromaticità. Nomenclatura dei composti aromatici.

### AMMINE E COMPOSTI AZOTATI

Nomenclatura. Proprietà fisiche. Basicità e acidità. Sintesi. Reazioni. Imminoteri. Ammidine. Idrasidi. Idracizine. Isocianati. Diimmidi. Uree. Carbammati. Amminoacidi.

### ESERCITAZIONI

Esercizi sulla struttura, sintesi e reattività dei principali gruppi funzionali.

#### Testo:

Consigliato: K.P.C. Vollhardt, *Organic Chemistry*, W.H. Freeman and Co., New York

Testi di consultazione:

A. Streitwieser, Jr., C.H. Heathcock, *Introduzione alla Chimica Organica*, Ed. Piccin

T.R. Morrison, R.N. Boyd, *Chimica Organica*, Ed. Ambrosiana

A.L. Ternay, *Chimica Organica Contemporanea*, Ed. Ambrosiana

T.W.G. Solomons, *Chimica Organica*, Ed. Grassi  
N.L. Allinger et al., *Chimica Organica*, Ed. Zanichelli.

Programma svolto nell'a.a. 89/90

## 7. CALCOLO NUMERICO

PROF.SSA FLAVIA DE TISI

1. Analisi degli errori.  
Tipi di errore. Propagazione degli errori. Stima. Malcondizionamento. Stabilità.
2. Equazioni e sistemi lineari e non lineari.  
Caso unidimensionale, metodi iterativi.  
Cenni al caso multidimensionale.  
Sistemi lineari. Metodi diretti e iterativi. Studio della convergenza e dell'errore.
3. Inversione di matrice. Autovalori.
4. Approssimazione di funzione.  
Interpolazione. Funzioni soline. Sviluppo in serie di funzioni. Studio dell'errore.
5. Integrazione numerica.  
Formule elementari. Formule adattive.
6. Equazioni differenziali.  
Equazioni differenziali ordinarie. Metodi ad uno o più passi.  
Metodi Predictor-Corrector.  
Cenni al problema della valutazione dell'errore ed alla stabilità.  
Cenni alle equazioni dalle derivate parziali.

#### Testi consigliati:

An introduction to numerical computations. Yacowitz-Szidarovsky Maxwell-McMillan International Editors.

Applied Numerical Analysis. Curtis F. Gerald - Patrick O. Wheatley Addison-Wesley Publishing Company.

## 8. LABORATORIO DI PROGRAMMAZIONE E CALCOLO

PROF. MASSIMILIANO LUNELLI

1. Componenti ed architettura degli elaboratori. Sistemi operativi. Linguaggi di programmazione.

2. Programmazione strutturata ed integrata. Rappresentazione degli enti nell'elaboratore. Limitazioni ed attenzioni critiche nell'uso degli elaboratori.
3. Algoritmi sequenziali e paralleli.
4. Sviluppo di programmi. Utilizzo di librerie e sistemi.

Le esercitazioni seguono il corso parallelo di Calcolo Numerico codificando algoritmi od utilizzando librerie matematiche o sistemi di programmazione anche simbolica per evidenziare risultati significativi.

Le esercitazioni in parte saranno svolte in aula con l'ausilio di elaboratori ed in parte si cercherà di portare gli studenti individualmente a diretto contatto con la strumentazione di calcolo.

Oltre ai testi segnati nel corso di Calcolo Numerico si ritiene utile che lo studente possa accedere alle informazioni dei manuali di programmazione FORTRAN, QUICBASIC, MATH-CAD, MATH-LAB, DERIVE.

## 9. FISICA GENERALE (2° corso)

PROF. LUCIANO REATTO

### *Campo elettrostatico*

Introduzione ai campi vettoriali. Il campo elettrostatico. Legge di Coulomb. Campo e potenziale elettrostatico. Teorema di Gauss. Operatori differenziali: divergenza e rotore. Linee di forza. Superfici equipotenziali.

Dipolo elettrico e suo campo. Campo dato da uno strato piano semplice e doppio di carica. Energia di un campo elettrostatico. Campo e potenziale in presenza di conduttori. Induzione totale, esperienze e applicazioni. Campo alla superficie di un conduttore. Capacità di un conduttore. Condensatore piano. Energia immagazzinata in un condensatore.

### *Corrente elettrica*

Corrente e densità di corrente. Principio di conservazione della carica ed equazione di continuità. Conduttività e resistività. Modello di conduzione elettrica a livello microscopico. Legge di Ohm. Effetto Joule. Forza elettromotrice. Fenomeni di conduzione nei principali tipi di conduttori.

Influenza della temperatura sulla resistenza. Superconduttività, sue applicazioni.

Effetti termici, chimici e magnetici della corrente elettrica.

### *Interazioni magnetiche*

Magneti naturali. Forza su una carica in moto in presenza di correnti elettriche. Forza di Lorentz. Vettore induzione magnetica  $\mathbf{E}$ . Campo magnetico prodotto da correnti elettriche: legge di Biot-Savart, legge di Ampère-Laplace.

Proprietà del vettore  $\mathbf{B}$ . Legge della circuitazione di Ampère. Applicazioni: campo magnetico di un filo rettilineo e di un solenoide. Forza e coppia su una

spira percorsa da corrente: momento di dipolo magnetico. Sistemi di unità di misura (MKSA), (CGS)es, (CGS)em e di Gauss. Definizione di Ampère assoluto. Effetto Hall. Segno dei portatori di carica nei vari conduttori.

### *Campi elettromagnetici*

Induzione elettromagnetica. Forza elettromotrice di induzione. Legge di Faraday. Circuito mobile in campo magnetico stazionario: flusso tagliato.

Mutua induzione e autoinduzione: induttanza, circuiti a costanti concentrate.

Energia di un campo magnetico. Circuito oscillante LC.

Legge di Ampère e conservazione della carica elettrica. Legge di Ampère-Maxwell. Correnti di spostamento.

Equazioni di Maxwell. Regimi particolari: stazionario e quasi stazionario. Soluzione delle equazioni di Maxwell per onde piane.

### *Elettromagnetismo e mezzi materiali*

Polarizzazione elettrica della materia, modelli elementari di polarizzazione.

Dielettrici lineari: suscettività e costante dielettrica. Dipendenza dalla frequenza della suscettività elettrica.

Magnetizzazione della materia. Sostanze diamagnetiche e paramagnetiche. Modelli elementari. Permeabilità e suscettività magnetica. Dipendenza dalla temperatura della suscettività magnetica. Sostanze ferromagnetiche e altre sostanze ordinate magneticamente. Isteresi: domini magnetici. Fenomeni magnetici, interazione di scambio e interazione dipolare magnetica.

Equazioni di Maxwell in presenza di mezzi materiali. Equazioni costitutive.

### *Preparazione per onde e onde elettromagnetiche*

Equazione delle onde. Onde longitudinali. Onde trasversali. Onde piane. Polarizzazione delle onde. Onde piane sinusoidali. Pulsazione temporale e pulsazione spaziale. Vettore d'onda. Onde progressive e stazionarie. Velocità di fase e velocità di gruppo. Onde sferiche.

Teoria elettromagnetica della luce. Spettro delle onde elettromagnetiche. Sorgenti e rivelatori. Sorgenti coerenti e incoerenti. Onde e stato di moto relativo sorgente-osservatore: effetto Doppler. Equazioni di Maxwell e onde elettromagnetiche. Energia di un'onda e pressione di radiazione. Vettore di Poynting.

### *Ottica*

Riflessione e rifrazione. Indice di rifrazione e velocità di propagazione. Principio di Huygens. Angolo limite. Dispersione della luce.

Riflessione, rifrazione e stato di polarizzazione della luce.

Propagazione della luce nei mezzi anisotropici. Birifrangenza. Dicroismo. Birifrangenza indotta. Sostanze otticamente attive. Rotazione nel piano di polarizzazione. Potere rotatorio magnetico.

Interferenza luminosa. Esperienza di Young e Fresnel. Interferenza da due e da più fenditure.

Diffrazione. Trattazione elementare della diffrazione da una fenditura. Potere separatore di un sistema ottico.

Diffrazione di raggi X da un reticolo cristallino. Legge di Bragg.

### *Interazione radiazione materia ed elementi di struttura della materia*

Emissione, assorbimento, emissione stimolata. Laser. Aspetti corpuscolari della luce: radiazione di corpo nero, effetto fotoelettrico, effetto Compton, produzione di coppie elettrone-positrone. Aspetti ondulatori delle particelle elementari: dualismo onde-corpuscolari. Principio di indeterminazione di Heisenberg. Meccanica quantistica e interpretazione probabilistica della funzione d'onda. Indistinguibilità delle particelle: statistica di Fermi e statistica di Bose. Il nucleo atomico. Sue dimensioni e struttura.

### *Stati elettronici nei solidi*

Modello di elettroni quasi liberi, energia di Fermi e superficie di Fermi, densità di stati. Stati elettronici nel modello del legame forte, bande di energia. Elettroni in potenziale periodico, bande di valenza e bande di conduzione. Metalli, isolanti e semiconduttori. Impurezze nei semiconduttori, semiconduttori drogati N e P. Determinazione sperimentale delle bande di energia. Proprietà di trasporto e proprietà ottiche di metalli. Metalli e lavoro di estrazione. Effetto termoelettrico. Contatto tra metalli diversi: effetto Volta; effetto termoelettrico.

È indispensabile che gli studenti si abituino ad usare indifferentemente i seguenti sistemi di unità di misura: (M.K.S.A.) - (C.G.S.)<sub>es</sub> - (C.G.S.)<sub>em</sub> - sistema di Gauss.

### *Libri di testo consigliati:*

M. Alonso, B.J. Finn: *Elementi di Fisica per l'Università*, vol. II e vol. III, Bilingua, Addison Wesley Publishing Co.  
L. Lovitch e S. Rosati: *Fisica Generale: Eletticità, magnetismo e ottica*, Editrice Ambrosiana.  
*La Fisica di Berkeley?*, vol. 2 e 3, Zanichelli.

## 10. LABORATORIO DI FISICA GENERALE

PROF.SSA LINA ZUFFI

### PARTE I

#### *Le variabili a una dimensione*

Variabili statistiche e variabili casuali. Gli indici di posizione e di dispersione. Momenti e funzione ad esse collegate. Le principali variabili casuali.

#### *Le variabili a due dimensioni*

Teoria della connessione. Teoria della correlazione e della regressione.

#### *Operazioni sulle variabili casuali*

Funzioni e successioni di variabili casuali.

#### *Inferenza statistica*

Distribuzioni campionarie. Teoria della stima. Teoria della verifica delle ipotesi.

### *Il piano degli esperimenti*

Esperimento casuale semplice. Esperimento casuale a scomparti. Esperimento ai quadrati latini. Esperimento classico. Esperimento fattoriale. Esercitazioni sulla programmazione degli esperimenti.

### PARTE II

#### *Aspetti di elettromagnetismo e strumenti di misura*

Richiami di elettrostatica nel vuoto e nei dielettrici, il vettore spostamento elettrico  $D$ . Esercizi di Elettrostatica. Condensatori, connessi in serie e in parallelo. Forze sulle armature, forze sul dielettrico. Esempi di generatori di forza elettromotrice. Circuiti elettrici in regime stazionario e quasi stazionario, leggi di Kirchhoff, applicazioni. Forze e coppie tra circuiti percorsi da corrente.

Generatori di corrente alternata, induttori in serie e in parallelo. Trasformatori.

Esempi elementari di circuiti: RC, RL, RLC; oscillazioni smorzate e oscillazioni forzate. Impedenza e reattanza capacitiva e induttiva. Valori efficaci e potenza di una corrente alternata.

Richiami di magnetismo, vettore  $B$  e vettore  $H$ . Magneti permanenti e loro caratteristiche. Esercizi di magnetismo. Esempi di moto di particelle cariche in campo elettrico e magnetico.

Bilancia di torsione. Voltmetro di Lord Kelvin. Voltmetro e quadranti. Amperometro assoluto. Amperometro Déprez-D'Arsonval. Moto dell'equipaggio mobile del galvanometro. Flussometro Galvanometro balistico.

#### *Aspetti di ottica e strumenti di misura*

Ottica geometrica. Specchio piano e sferico. Costruzione delle immagini. Lenti sottili. Aberrazioni. Principali strumenti ottici.

Prisma e spettroscopio a dispersione. Polarizzazione lineare e circolare della luce. Propagazione della luce nei mezzi anisotropi. Polarizzatori e polarimetri.

Richiami di interferenza e diffrazione della luce. Esempi di calcolo di figure di interferenza e diffrazione. Spettroscopio a reticolo.

Sorgenti di onde elettromagnetiche nelle varie regioni spettrali e loro rivelatori.

## 11. LABORATORIO DI CHIMICA ORGANICA (1° corso)

PROFF. CESARE GENNARI, GIULIANA RICCA

Il corso è semestrale e articolato in due fasi distinte:

- 1) Ciclo di lezioni teoriche.
- 2) Esercitazioni di laboratorio.

#### *Ciclo di lezioni teoriche*

Analisi elementare qualitativa, analisi elementare quantitativa, determinazione della formula minima, del numero di insaturazioni, peso e formula molecolare.

Cenni di spettroscopia per la caratterizzazione di sostanze organiche. Problemi di sicurezza nel laboratorio di chimica organiche.

Introduzione alle seguenti tecniche sperimentali: cristallizzazione, estrazione con solvente, distillazione semplice e frazionata, nel pieno e sotto vuoto, cromatografia su strato sottile e su colonna.

Problemi sperimentali collegati alle seguenti reazioni: ossidazioni, riduzioni, reazioni di condensazione reazioni di Grignard.

#### *Esercitazioni di laboratorio*

1) Esecuzione individuale da parte dello studente delle operazioni fondamentali del laboratorio di chimica organica quali: la determinazione del punto di fusione, la cristallizzazione, l'estrazione con solvente, la distillazione semplice e frazionata nel pieno e nel vuoto, la cromatografia su strato sottile, cromatografia su colonna.

2) Esecuzione da parte dello studente di alcune delle più comuni reazioni della chimica organica.

3) Caratterizzazione dei prodotti sintetizzati mediante metodi spettroscopici.

#### *Libro di testo:*

D.S. Pasto, C.R. Johnson, Laboratory text for Organic Chemistry, Prentice Hall, Inc.

#### *Libro consigliato per la consultazione:*

C.H. Heathcock, A. Streitwieser Jr., Introduzione alla chimica organica, Piccin Editore, Padova.

## **12. CHIMICA INORGANICA (1° corso)**

PROF. VLADIMIRO SCATTURIN

#### *Le particelle fondamentali secondo la meccanica classica e ondulatoria*

Moto traslatorio, rotazionale, vibrazionale; moti in campo coulombiano: loro energia e caratteristiche nell'ambito degli atomi e delle molecole.

#### *Struttura e proprietà dell'atomo*

Orbitali idrogenoidi e numeri quantici. Configurazioni elettroniche e sistema periodico. Energie degli orbitali e regole di Slater.

Dimensioni atomiche. Potenziali di ionizzazione e affinità elettronica. Compattezza degli atomi e periodicità delle proprietà chimiche degli atomi.

#### *Legame chimico e sue proprietà generali*

Legame metallico, covalente ed ionico. Proprietà direzionali del legame chimico. Dimensioni ed energie del legame chimico.

Covalenza e polarità del legame. Elettronegatività degli atomi in un legame. Entalpia di formazione dei composti.

#### *Legame chimico e stati di aggregazione*

Stati di aggregazione e forze di Van der Waals. Ioni e loro Configurazioni elettroniche. Energia del legame ionico.

Impacchettamento di ioni e cristalli ionici. Strutture compatte. Interstizi nelle strutture compatte e numeri di coordinazione. Dimensioni degli ioni e strutture cristalline ioniche. Energie reticolari ioniche. Ciclo di Born-Haber. Stabilità dei composti ionici. Generalizzazione del ciclo di Born-Haber.

#### *Reattività dei composti e loro proprietà chimiche*

##### a) Acidi e basi di Lewis

Definizione. Classificazione degli elettrofili e dei nucleofili. Neutralizzazione e sostituzioni. Grandezze termodinamiche ed equilibrio chimico. Acidi e basi duri e molli.

Acidi e basi di Brønsted: forza, ruolo del solvente, struttura.

##### b) Riducenti ed ossidanti

Formalismi. Energia libera e lavoro elettrico. Potenziali normali e diagrammi dell'energia libera. Potenziali di elettrodo ed attività: formazione di acidi e basi, prodotti poco solubili, complessi. Diagrammi potenziali/Attività nei vari sistemi chimici.

##### c) Leganti e nuclei centrali

Composti di coordinazione. Nuclei e leganti come acidi e basi di Lewis. Metodi stereochimici di determinazione della struttura dei complessi.

Il legame nei complessi: teoria del campo cristallino e dell'orbitale molecolare. Serie spettrochimica. Complessi organometallici. Stabilità di coordinazione.

#### *Testi consigliati*

K.B. Harvey, G.B. Porter, *Introduction to Physical Inorganic Chemistry*, Ed. Addison & Wesley, Pub. Co. Inc. (Traduzione Italiana Piccin Editore);

F.A. Cotton, G. Wilkinson, *Advanced Inorganic Chemistry*, Ed. Interscience Publishers (Traduzione Italiana Casa Editrice Ambrosiana);

F. Basolo, R. Johnson, *Coordination Chemistry*, Ed. Benjamin Inc. (Traduzione Italiana Zanichelli).

V. Scatturin, *Chimica Generale ed Inorganica. Proprietà atomiche e molecolari*, UTET 1987.

## **13. CHIMICA FISICA (1° corso)**

PROF. ERMANNO GIANINETTI

#### *Elementi di Chimica Quantistica*

Introduzione storica: variabili dinamiche; funzioni di stato; stati stazionari. La meccanica classica. Le equazioni di Newton. Le equazioni di Lagrange. Le equazioni di Hamilton. La struttura della materia. Il corpo nero. La capacità termica dei solidi. L'effetto fotoelettrico. L'effetto Compton. I raggi X. Gli

spettri atomici. Aspetti ondulatori e principio di complementarità. L'insorgenza delle restrizioni quantiche. L'equazione di Schrodinger. L'ipotesi di Born. La particella nella buca a una dimensione. I modi traslazionali. La particella nella buca a due e tre dimensioni. L'utilizzo chimico del modello: gli spettri elettronici dei polieni. La densità elettronica. Effetti batocromici ed ipsocromici negli spettri elettronici. Gli elettroni di conduzione nei metalli. Degenerazione e simmetria. Operatori ed osservabili. Le proprietà più importanti sugli operatori. I teoremi sugli operatori. L'equazione di Schrodinger dipendente al tempo. La particella in presenza di barriere o buche di potenziale.

Il moto vibrazionale. Il modello armonico. La spettroscopia infrarossa. Il modo rotazionale. I modelli della particella sull'anello e sulla sfera. La spettroscopia a microonde. I rotori: sferico, cilindrico, lineare, asimmetrico. La degenerazione dei livelli e gli stati compatibili.

I sistemi monoelettronici. L'atomo di idrogeno e gli atomi idrogenoidi. I sistemi polielettronici. L'atomo di elio. Il metodo del campo autoconsistente. L'antisimmetria. Il determinante di Slater. L'esperienza di Stern-Gerlach. Lo spin dell'elettrone. Stato di singoletto e di tripletto. Le autofunzioni di  $L^2$ ,  $L_z$ ,  $S^2$ ,  $S_z$ . La degenerazione dei livelli nell'atomo di carbonio.

Il momento angolare orbitale e le sue regole. Il momento angolare di spin. L'accoppiamento spin-orbita. Modello di Russell-Saunders. Modello j-j. Interpretazione delle regole di Hund.

La teoria della perturbazione indipendente dal tempo. Applicazioni e modelli. L'atomo di elio. La teoria della variazione. Il principio ed il metodo variazionale. L'approssimazione della combinazione lineare.

L'interazione di atomi con campi elettrici e magnetici. Effetti Stark e Zeeman normale ed anomalo.

Le molecole e la loro struttura. La classificazione dei metodi. Da quelli *ab initio* a quelli empirici. La molecola ione  $H_2^+$  e la molecola  $H_2$ . La genesi del metodo di Huckel. Il concetto di base: completa, minima, di valenza. Applicazione allo studio delle proprietà elettroniche e di simmetria del pirrolo e del sistema  $H_3^+$  ( $n = -1, 0, +1$ ). I parametri di reattività. Densità di carica. Ordine di legame. Valenza libera. La struttura delle molecole. Le regole dell'ibridizzazione.

Le regole di Woodward-Hoffman e la simmetria orbitale. Potenzialità e limiti. Le equazioni extratermodinamiche di Hammett interpretate mediante il modello degli orbitali di frontiera.

#### Principi di Spettroscopia

La teoria della perturbazione dipendente dal tempo. Transizioni stimulate e spontanee. Il momento della transizione. La probabilità di transizione. La regola d'oro di Fermi. La formulazione di Einstein. Le regole di selezione per le diverse spettroscopie: rotazione, vibrazione, elettronica. Esempi ed applicazioni elementari.

#### Testi adottati

P.W. Atkins "Physical chemistry", Oxford Press 4<sup>a</sup> edizione 1989.

P.W. Attkins "Molecular Quantum mechanics", Oxford Press 1983.

## 14. LABORATORIO DI CHIMICA FISICA (1° corso)

DR.SSA ELENA SELLI

Metodi grafici e numerici per la risoluzione di problemi riguardanti i seguenti argomenti:

- a) calorimetria, entalpia di reazione, legge di Hess e legge di Kirchhoff, bilancio entalpico in presenza di passaggi di stato o di reazioni chimiche.
- b) Trasformazioni isobare, isocore, isoterme e adiabatiche (sia reversibili che irreversibili) di gas perfetti, equazione di Gibbs-Helmholtz, processi ciclici.
- c) Potenziale chimico e sistemi aperti, grandezze parziali molari, gas reali, fugacità, compressibilità, coefficiente di attività, variabili ridotte ed equazione degli stati corrispondenti, miscele di gas reali.
- d) Equilibrio e processi spontanei, equilibrio tra due fasi della stessa sostanza, equazione di Clausius-Clapeyron, calcolo del calore di vaporizzazione, calcolo della variazione della temperatura di transizione di fase con la pressione.
- e) Soluzioni ideali e reali, equilibrio tra soluzioni e miscele gassose, solubilità di gas e di solidi in liquidi e ripartizione di un soluto tra diversi solventi.
- f) Equilibri di reazione chimica, isoterma di reazione, isoterma di Van't Hoff ed equazione di Van't Hoff per il calcolo della costante di equilibrio, variazione della costante di equilibrio con la temperatura e sue implicazioni, equilibri combinati ed eterogenei.

## 15. LABORATORIO DI CHIMICA ANALITICA (2° corso)

PROF. G.M. ZANDERIGHI

#### Misura ed errore

Misura e calcolo. Metodiche diverse di misurazione (scale di confronto, numerosità di insiemi semplici, indiretta).

Errori determinati e indeterminati.

Precisione ed accuratezza. Propagazione dell'errore. Cifre significative. Arrotondamenti e rappresentazioni grafiche.

Elementi di statistica: distribuzione degli errori. Valore medio. Deviazione standard.

Applicazione a piccole serie di dati sperimentali: test t. Intervallo di confidenza. Confronto di medie. Criteri per lo scarto di dati. Curve di calibrazione.

#### Strumenti e tecniche di laboratorio

Quaderno. Bilancia. Massa e peso. Bilancia analitica meccanica ed elettronica.

Riduzione pesata al vuoto. Errori di pesata. Buretta. Vetreria tarata per trasferire e per contenere. Tarature. Effetto temperatura.

Filtrazione, incenerimento filtro e calcinazione nella manipolazione di precipitati.

Classificazione prodotti chimici commerciali.  
Tossicità e norme di sicurezza.

#### *Solubilità di composti ionici*

Prodotto di solubilità. Effetto ione comune.  
Forza ionica. Attività. pH e solubilità.

#### *Analisi gravimetrica*

Applicazioni analitiche delle misure gravimetriche. Processo di precipitazione e sua influenza sulla purezza del prodotto finale.  
Calcoli nell'analisi gravimetrica.  
Applicazione: precipitanti inorganici e organici.

#### *Analisi volumetrica*

Definizione. Reazioni e criteri di fattibilità. Standard primari e soluzioni standard.  
Calcoli nell'analisi volumetrica. Curve di titolazione. Determinazione del punto finale. Errore.  
Titolazioni dirette. Inverse. Per spostamento. Indirette.

#### *Titolazione per precipitazione*

Calcolo curve di titolazione.  
Determinazione del punto finale: turbidimetria. Nefelometria. Metodi di Mohr. Volhard. Fajans.  
Applicazioni.

#### *Equilibri Acido-base*

Acidi e basi forti e deboli in soluzione acquosa.  
Tampone. Potere tamponante. Uso pratico.  
Acido e basi poliprotici. Composizione della soluzione in funzione del pH.  
Titolazione di sistemi complessi e selettività. Calcolo curve di titolazione.  
Determinazione del punto finale con indicatori. Criteri di selezione. Errori.  
Applicazioni.

#### *Titolazioni acido-base in solventi non acquosi*

Tipi di solvente.  
Reazioni di neutralizzazione in solventi anfiprotici. Influenza di acidità intrinseca, prodotto ionico e costante dielettrica del solvente.  
Solventi aprotici e miscele di solventi.  
Determinazione del punto finale.  
Applicazioni.

#### *Titolazioni complessometriche*

Complessanti e chelanti. Applicabilità analitica. EDTA e acidi aminopolycarbossilici. Costanti di formazione assoluta e condizionale. Selettività e mascheramento.  
Calcolo curve di titolazione.

Indicatori per complessometria e criteri di selezione.  
Applicazioni.

#### *Conduttimetria*

Conducibilità elettrica delle soluzioni. Conducibilità equivalente. Legge di Kohlrausch. Strumentazione e celle di misura. Misure dirette. Applicazioni analitiche.  
Titolazioni: acidi e basi forti, deboli, molto deboli, di precipitazione e complessometriche; fattori di diluizione e determinazione del punto finale.  
Applicazioni.

#### *Titolazioni di ossido riduzione*

Celle elettrochimiche. Potenziali standard. Potenziali formali. Celle e potenziali di cella.  
Calcolo curve di titolazione (Dipendenza dalla concentrazione e  $n$  e).  
Indicatori e criterio di selezione.  
Preriduzioni e preossidazione.  
Applicazioni: permanganato, cerio, bicromato, iocimetria, iodato e bromato. Ferro (II), tiosolfato, iodometria.

#### *Potenziometria*

Elettrodi di riferimento.  
Elettrodi indicatori: a membrana (pH e altri) a stato solido, a membrana liquida, composti.  
Misure potenziometriche dirette.  
Potenziale di giunzione liquida.  
Calibrazione elettrodo. Fonti di errore.  
Metodo delle aggiunte successive.

#### *Titolazioni potenziometriche*

Determinazione del punto finale.  
Metodi del punto finale.  
Metodi grafici. Derivate prima e seconda. Metodo di Gran. Applicazioni a titolazioni di precipitazione, neutralizzazione. Formazione di complessi, ossidoriduzioni, titolazioni differenziali.

Parte essenziale del corso sono le esercitazioni di laboratorio. La discussione dei risultati ottenuti e delle tecniche sperimentali usate costituiscono argomento della prova d'esame unitamente ad applicazioni di calcoli numerici relativi alle metodologie analitiche sviluppate nel corso.

## VECCHIO ORDINAMENTO

### 16. CHIMICA ANALITICA

PROF. FRANCESCO CARIATI

#### *Programma delle lezioni*

- 1) La strumentazione in chimica analitica: una introduzione generale.
- 2) Introduzione alla spettroscopia atomica e molecolare e alle tecniche spettroscopiche.  
La natura dell'energia radiante, la quantizzazione dell'energia, interazione radiazione materia, i differenti tipi di spettroscopia.  
Le soluzioni strumentali: sorgenti di radiazione, selezione di lunghezze d'onda, la rivelazione e determinazione della energia radiante.  
Cenni ai dettagli di costruzione di spettrofotometri e spettrografi, la strumentazione i.r. e visibile-ultravioletta, le leggi dell'assorbimento.
- 3) La spettroscopia infrarossa.  
La teoria elementare delle vibrazioni molecolari: cenni alla anarmonicità ed agli spettri rotovibrazionali.  
Gli spettri infrarossi di molecole poliatomiche ed i gruppi funzionali. Cenni ed affetti elettronici, di stato fisico, di solvente. Analisi quali e quantitative.  
Esercitazioni di interpretazione di spettri infrarossi pari a circa 10 ore.
- 4) La spettroscopia visibile-ultravioletta.  
Introduzione ai fondamenti della spettroscopia molecolare elettronica. Gli spettri elettronici e le transizioni elettroniche più comuni.  
Studio dei cromofori semplici: butadienico, benzenico, etc.  
Applicazioni analitiche quali e quantitative.  
Esercitazioni di lettura ed interpretazione di spettri elettronici di circa 10 ore.
- 5) La spettroscopia di risonanza magnetica nucleare.  
Le proprietà magnetiche dei nuclei.  
L'interpretazione classica e quantomeccanica del fenomeno di risonanza magnetica nucleare.  
La strumentazione. Cenni ai fenomeni di rilassamento nucleari e loro relazioni con intensità e larghezza di una banda.  
Il Chemical Shift: parte isotropica ed anisotropica.  
L'accoppiamento spin-spin di primo ordine e cenni all'ordine superiore.  
Costante di accoppiamento e suo significato chimico.  
Applicazioni analitiche quali e quantitative.  
Esercitazioni ed interpretazione di spettri N.M.R. pari a circa 10 ore.
- 6) Introduzione alla spettrometria di massa.  
Il principio fisico.  
La strumentazione in dettaglio.  
Introduzione ai concetti elementari della frammentazione molecolare.

La determinazione del peso molecolare e della formula bruta.  
Applicazioni analitiche quali e quantitative.

7) Cenni sui metodi di rilassamento, diffusione e rifrazione.  
I meccanismi di rilassamento.

La spettroscopia Raman.

Fluorescente molecolare, atomica e dei raggi X.

8) Cenni sulle spettroscopie con radiazioni ad alta energia.  
Raggi X: diffrazione ed assorbimento.

La spettroscopia di elettroni: PES, AUGER e ESCA.

Il corso si baserà su lezioni teoriche, su circa 28-35 ore di esercitazioni in gruppi di sette-otto persone su materiale già disponibile; l'esame consisterà in un compito scritto relativo all'interpretazione di spettri e in un esame orale.

*Testo consigliato:*

R. Ugo, *Analisi Chimica Strumentale*, L'Editrice Scientifica, L.G. Guadagni.

### 17. CHIMICA ORGANICA II

PROF. GIANCARLO JOMMI

#### *Cicloalcani e derivati*

Conformazioni di idrocarburi aciclici. Conformazioni di idrocarburi aliciclici: anelli piccoli, medi e grandi. Conformazioni di decaline e di sistemi tricyclici. Problemi configurazionali in semplici derivati dei cicloalcani. Atropoisomeria. Sintesi di cicloalcani e di loro derivati semplici. Termodinamica dei processi di chiusura ed apertura di anelli. Proprietà di carbeni e di ciclopropani. Proprietà di ciclobutani, ciclopentani e cicloesani.  
Reazioni elettrocicliche e regole di Hofmann e Woodward. Cenni sulla chimica dei radicali. Cenni di fotochimica organica.  
Reazioni di trasposizione in derivati cicloalcanici. Reazioni transanulari. Reazioni di deidrogenazione e idrogenolisi.  
Sintesi e proprietà di sistemi bi- e policiclici.

#### *Composti aromatici*

- a) Struttura del benzene. Aromaticità ed antiaromaticità. Cationi ed anioni aromatici. Annuleni. Bifenile e derivati. Idrocarburi aromatici a due o più anelli condensati: naftalene, fenantrene, antracene e sistemi più complessi. Composti eterociclici aromatici.
- b) Sostituzione elettrofila di composti aromatici ed eterociclici. Stato di transizione, intermedi labili, controllo cinetico e termodinamico nelle sostituzioni aromatiche. Alchilazioni ed acilazioni di Friedel-Crafts. Reazioni di clorometilazione, formilazione e bakeliti. Reazioni di alogenazione, nitratura, solfonazione, nitrosazione ed idrossilazione.

- Effetti induttivi e di mesomeria dei sostituenti. Equazione di Hammett. Sostituzioni in sistemi policiclici condensati.
- c) Ossidazioni di composti aromatici. Chinoni. Riduzioni di composti aromatici.
- d) Alogenoderivati aromatici, loro proprietà fisiche e reattività. Sostituzione nucleofila aromatica. Effetto dei solventi sulle velocità di sostituzioni elettrofile e nucleofile aromatiche e sulla natura dei prodotti. Reazioni con benzino come intermedio labile. Composti organometallici da alogenuri aromatici.
- e) Fenoli e loro proprietà fisiche e chimiche. Equilibrio chetoenolico nei fenoli e valutazione della relativa energia libera. Difenoli e polifenoli della serie del benzene. Acidi solfonici della serie del benzene e del naftalene e fenoli relativi. Fenolo da isopropilbenzene e perossidazione di idrocarburi aromatici. Eteri fenolici. Trasposizione di Claisen e reazioni correlate. Carbonatazione di fenoli ed ossiacidi aromatici.
- f) Composti arilalchilici e loro reattività. Alogenazione benzilica e reazioni di alogenoderivati benzilici. Alcool benzilico e derivati. Aldeide benzoica e derivati. Chetoni diarilici ed arilalchilici. Acido benzoico e derivati. Acido cinnamico. Stirene e polimeri. Difenil - e trifenilmetano. Composti aromatici polifunzionali.
- g) Riduzione di nitrocomposti aromatici. Ammine aromatiche e loro proprietà fisiche e chimiche. Derivati di ammine aromatiche e loro comportamento chimico. Nitro-composti aromatici. Aril-idrossilammine. Azo-, idrazo- ed azoossi-derivati aromatici. Azidi
- h) Diazoderivati e sali da diazonio. Sintesi, proprietà fisiche, reazioni radicaliche e ioniche dei sali di diazonio. Copolazione dei sali di diazonio e centri sui coloranti organici.
- i) Acidi solfonici aromatici. Tiofenoli e tioeteri aromatici. Acidi solfenici, acidi solfinici, solfossidi, solfoni e sali di solfonio. Solfocloruri e solfonammidi. Carbanioni stabilizzati dallo zolfo. Preparazioni e reazioni di ilidi.
- l) Derivati organici del fosforo. Derivati del fosforo come nucleofili. Reazioni dei sali di fosfonio. Esteri dell'acido fosforoso e dell'acido fosforico. Acidi fosfonici. Ilidi del fosforo e reazione di Wittig. Derivati organici del silicio. Preparazioni e proprietà. Derivati organici del boro. Idruri di boro e impiego nella sintesi organica.
- m) Riassistenti molecolari. Reazioni di Meerwein Hofmann, Beckmann, Baeyer-Villiger, Wittig, Stevens, Favorskij, ecc. Riassistenti di fenilidrossilammine, fenilidrazire, del benzile, ecc.
- n) Uso di dati spettroscopici nella risoluzione di semplici problemi organici.

#### Composti eteroaromatici

Generalità sulle proprietà chimiche e fisiche di semplici composti eteroaromatici; aspetti elementari della loro sintesi. Pirrolo, Furano, Tiofene, Indolo, Benzofurano, Pirazolo, Imidazolo, Ossazolo, Isossazolo, Tiazolo. Piridina, Chinolina, Isochinolina. Pirani e sali di Piillio.

#### Testo

N.L. Allinger, M.P. Cava, D.C. De Jongh, C.R. Johnson, N.A. Lebel, C.L. Stevens, *Chimica organica*, Ed. Zanichelli.

#### Testi da consultare:

A. Streitwieser, Jr. C.H. Heathcock, *Introduzione alla chimica organica*, Piccin Editore, Padova.  
 R.T. Morrison e R.N. Boyd, *Chimica Organica*, Ed. Ambrosiana;  
 A.L. Ternay, *Chimica Organica Contemporanea*, Ed. Ambrosiana;  
 T.W.C. Solomon, *Organic Chemistry*, Wiley International Edition;  
 R.O.C. Normann, *Principi di sintesi organica*, Ed. Piccin;  
 P. Sikes, *Guida ai meccanismi delle reazioni organiche*, Ed. Martello;  
 R.D. Woodward, R. Hofmann, *Conservazione della simmetria degli orbitali*, Ed. Ambrosiana;  
 G. Hallas, *Stereochimica Organica*, Ed. Martello.

#### Testi di esercizi

T. Turner, *The Design of Organic Synthesis*, Elsevier Scient. Company;  
 P.W.G. Scломons, G.E. Fernandez, *La chimica organica attraverso gli esercizi*, Ed. Grasso.  
 S. Warren, *Designing Organic Syntheses*, Wiley Int. Ed.

## 18. ESERCITAZIONI DI ANALISI CHIMICA QUANTITATIVA

DR.SSA MARIA GRASSI

#### Misura ed errore

Misura e calcolo. Metodiche diverse di misurazione (scale di confronto, numerosità di insiemi semplici, indiretta). Errori determinati e indeterminati. Precisione ed accuratezza. Propagazione dell'errore. Cifre significative. Arrotondamenti e rappresentazioni grafiche. Elementi di statistica: distribuzione degli errori. Valore medio. Deviazione standard. Applicazione a piccole serie di dati sperimentali: test t. Intervallo di confidenza. Confronto di medie. Criteri per lo scarto di dati. Curve di calibrazione.

#### Strumenti e tecniche di laboratorio

Quaderno. Bilancia. Massa e peso. Bilancia analitica meccanica ed elettronica. Riduzione pesata al vuoto. Errori di pesata. Buretta. Vetreria tarata per trasferire e per contenere. Tarature. Effetto temperatura. Filtrazione, incenerimento filtro e calcinazione nella manipolazione di precipitati. Classificazione prodotti chimici commerciali. Tossicità e norme di sicurezza.

#### Solubilità di composti ionici

Prodotto di solubilità. Effetto ione comune. Forza ionica. Attività. pH e solubilità.



### *Analisi gravimetrica*

Applicazioni analitiche delle misure gravimetriche. Processo di precipitazione e sua influenza sulla purezza del prodotto finale.  
Calcoli nell'analisi gravimetrica.  
Applicazione: precipitanti inorganici e organici.

### *Analisi volumetrica*

Definizione. Reazioni e criteri di fattibilità. Standard primari e soluzioni standard.  
Calcoli nell'analisi volumetrica. Curve di titolazione. Determinazione del punto finale. Errore.  
Titolazioni dirette. Inverse. Per spostamento. Indirette.

### *Titolazione per precipitazione*

Calcolo curve di titolazione.  
Determinazione del punto finale: turbidimetria. Nefelometria. Metodi di Mohr, Volhard, Fajans.  
Applicazioni.

### *Equilibri Acido-base*

Acidi e basi forti e deboli in soluzione acquosa.  
Tampone. Potere tamponante. Uso pratico.  
Acido e basi poliprotici. Composizione della soluzione in funzione del pH.  
Titolazione di sistemi complessi e selettività. Calcolo curve di titolazione.  
Determinazione del punto finale con indicatori. Criteri di selezione. Errori.  
Applicazioni.

### *Titolazioni acido-base in solventi non acquosi*

Tipi di solvente.  
Reazioni di neutralizzazione in solventi anfiprotici. Influenza di acidità intrinseca, prodotto ionico e costante dielettrica del solvente.  
Solventi aprotici e miscele di solventi.  
Determinazione del punto finale.  
Applicazioni.

### *Titolazioni complessometriche*

Complessanti e chelanti. Applicabilità analitica. EDTA e acidi aminopolicarbossilici. Costanti di formazione assoluta e condizionale. Selettività e mascheramento.  
Calcolo curve di titolazione.  
Indicatori per complessometria e criteri di selezione.  
Applicazioni.

### *Conduttimetria*

Conducibilità elettrica delle soluzioni. Conducibilità equivalente. Legge di Kohlrausch. Strumentazione e celle di misura. Misure dirette. Applicazioni analitiche.

**Titolazioni:** acidi e basi forti, deboli, molto deboli, di precipitazione e complessometriche; fattori di diluizione e determinazione del punto finale.  
**Applicazioni.**

### *Titolazioni di ossido riduzione*

**Celle elettrochimiche.** Potenziali standard. Potenziali formali. Celle e potenziali di cella.  
**Calcolo curve di titolazione** (Dipendenza dalla concentrazione e  $n$   $\epsilon$ ).  
**Indicatori e criterio di selezione.**  
**Preriduzioni e preossidazione.**  
**Applicazioni:** permanganato, cerio, bismato, iodimetria, iodato e bromato.  
**Ferro (II), tiosolfato, iodometria.**

### *Potenziometria*

**Elettrodi di riferimento.**  
**Elettrodi indicatori:** a membrana (pH e altri) a stato solido, a membrana liquida, composti.  
**Misure potenziometriche dirette.**  
**Potenziale di giunzione liquida.**  
**Calibrazione elettrodo. Fonti di errore.**  
**Metodo delle aggiunte successive.**

### *Titolazioni potenziometriche*

**Determinazione del punto finale.**  
**Metodi del punto finale.**  
**Metodi grafici.** Derivata prima e seconda. Metodo di Gran. Applicazioni a titolazioni di precipitazione, neutralizzazione. Formazione di complessi, ossidazioni, titolazioni differenziali.

### *Preparazione del campione analitico*

**Campionamento e attacco.**  
**Scelta del metodo analitico in funzione della concentrazione e di altre sostanze presenti.**  
**Separazione e mascheramento.**  
**Preconcentrazione.**

### *Separazioni analitiche*

**Precipitazione e formazione di complessi.**  
**Estrazione con chelanti.** Influenza del pH. Distribuzione in controcorrente come modello di separazione in continuo: distribuzione teorica, larghezza di banda, risoluzione.

### *Metodi cromatografici*

**Teoria della velocità di migrazione nella cromatografia per eluizione.** Teoria dei piatti teorici. Fattori cinetici e termodinamici che influenzano la risoluzione.  
**Applicazioni qualitative e quantitative delle separazioni cromatografiche.**  
**Metodo dello standard interno.**

### *Gascromatografia (GLC)*

Strumentazione. Fasi stazionarie.

Rivelatori: termoconducibilità, ionizzazione di fiamma, cattura di elettroni.

Applicazioni. Programmazione di temperatura.

### *Cromatografia liquida ad elevate prestazioni (HPLC)*

Strumentazione. Fasi stazionarie. Rivelatori.

Applicazioni. Gradiente di eluizione.

### *Cromatografia di scambio ionico*

Fasi stazionarie. Equilibri di scambio. Selettività. Rivelatori, sistemi di soppressione elettrolita.

Applicazioni.

### *Cromatografia di affinità*

Principio. Fasi stazionarie. Rivelatori.

Applicazioni.

### *Cromatografia di affinità*

Principi e applicazioni.

Parte essenziale del corso sono le esercitazioni di laboratorio. La discussione dei risultati ottenuti e delle tecniche sperimentali usate costituiscono argomento della prova d'esame unitamente ad applicazioni di calcoli numerici relativi alle metodologie analitiche sviluppate nel corso.

## 19. CHIMICA FISICA I

PROF. ALDO GAMBA

*La Meccanica Classica* come premessa della Meccanica Quantistica: L'equazione di Newton; e equazioni generalizzate del moto (Lagrangiana e Hamiltoniana). Le particelle e le traiettorie classiche. Le esperienze fondamentali non interpretabili mediante le leggi classiche.

*La Meccanica Quantistica*: l'origine della quantizzazione ed il confinamento della particella. La curvatura della funzione d'onda. L'ipotesi di Born. Gli operatori: loro proprietà e teoremi più importanti. Le osservabili e le variabili dinamiche.

I modi traslazionale, vibrazionale e rotazionale. Modelli e soluzioni quantomeccaniche. Le barriere potenziali ed il loro attraversamento.

Gli atomi e le molecole. La risoluzione dell'equazione di Schrodinger stazionaria per gli atomi di idrogeno e di elio. Lo spin e le funzioni d'onda polielettroni-

che. I momenti angolari orbitale e di spin. L'accoppiamento spin orbita. Simmetria ed antisimmetria della natura. Le molecole  $H_2^+$  ed  $H_2$ .

Classificazione dei metodi quantomeccanici per il calcolo delle energie e delle funzioni d'onda. Il metodo variazionale ed i metodi perturbativi applicati agli stati stazionari. I limiti di validità dei metodi empirici e semiempirici. L'impiego della simmetria per la classificazione degli stati elettronici e per la semplificazione dei calcoli. I parametri di reattività derivabili dalle funzioni d'onda molecolari. Le regole di Woodward-Hoffmann e le proprietà della simmetria molecolare. Le correlazioni extratermodinamiche di Hammett spiegate dalla teoria MO degli orbitali di frontiera.

### *I principi generali che governano le spettroscopie*

*La termodinamica statistica* come strumento per interpretare i principi della termodinamica, l'asimmetria della natura e le funzioni termodinamiche fondamentali, energia interna, entropia, energie libere di Helmholtz e Gibbs, entalpia. L'interpretazione statistica delle costanti di equilibrio. L'entropia residua e la terza legge della termodinamica. La degenerazione degli stati nucleari e le proprietà delle molecole biatomiche o mononucleari.

### *Testi adottati*

P.W. Atkins, "Physical Chemistry", Oxford Press - 4<sup>a</sup> ed. (1990)

P.W. Atkins, "Molecular Quantum Mechanics", Oxford Univ. Press, 2<sup>a</sup> ed. (1983)

D. Chandler, "Introduction to Modern Statistical Mechanics", Oxford Univ. Press (1987)

P.W. Atkins, "La Seconda Legge", Scientific American Books, New York (1984) traduzione italiana: Zanichelli ed. (1988)

## 20. ESERCITAZIONI DI CHIMICA FISICA I

PROF. CLAUDIO MARI

### *Trattamento statistico dei dati sperimentali:*

Distribuzione binomiale. Valore medio. Dispersione. Distribuzione di probabilità gaussiana. Funzioni di variabili casuali.

Il metodo dei minimi quadrati con metodo matriciale: valutazione della varianza e suo significato statistico. Metodo dei minimi quadrati per polinomi di grado superiore al primo, per curve modello vincolate e per curve modello non lineari nei parametri. Legge di propagazione degli errori. Minimo assoluto di una funzione di più variabili con il metodo della variazione dei parametri in successio-

ne, della discendente più rapida e di Raphson-Newton. Metodi numerici di integrazione, di risoluzione di una equazione qualsiasi e di interpolazione.

#### *Il calore come grandezza macroscopica e sua misura*

Calore specifico medio (calcolo da dati calorimetrici). Capacità termica molare: sua determinazione e suo andamento con la temperatura. Legge di Kirchoff. Metodo grafico per calcolo della funzione  $H$  vs.  $T$  e  $\ln K_p$  vs.  $T$  noto per tutti  $\ln K_p$  vs.  $T$ .

Bilancio entalpico in presenza di passaggi di stato e in presenza di reazioni chimiche.

#### *Variazioni delle funzioni termodinamiche dei gas perfetti*

Trasformazioni isobare, isoterme, isocore. Equazione di Gibbs-Helmholtz. Trasformazioni adiabatiche. Processi ciclici.

#### *Potenziale chimico, grandezze parziali molari e gas reali*

Potenziale chimico e sistemi aperti. Grandezze molari e loro determinazione. Gas reali, fugacità e comprimibilità. Equazione del viriale, di Van del Waals e legge degli stati corrispondenti. Miscele di gas reali (metodo dello pseudo punto critico e di Dalton-Amagat).

#### *Equilibri di fase*

Applicazione dell'equazione di Gibbs-Helmholtz ai processi a  $P$  e  $T$  costante. Equilibrio tra le fasi ed equazione di Clausius-Clapeyron (esercizi con metodi grafici e numerici). Trasformazione di fase. Equazione di stato. Diagramma di fase. La regola delle fasi. Ordine di transizione e transizione lambda.

#### *Equilibri di soluzione*

Il potenziale chimico della miscela gassosa perfetta, della soluzione non ideale. Soluzione ideale secondo le leggi di Raoult e di Henry. Dipendenza della costante di Henry dalla temperatura e calore di soluzione. Regola di Lewis-Randall. Equilibrio tra soluzione ideale binaria liquida e la corrispondente miscela gassosa perfetta. Soluzioni di fase di solidi in liquidi. Legge di ripartizione di Nernst. Deviazione dal comportamento ideale: attività e coefficiente di attività. Equazione di Gibbs-Duhem.

#### *Equilibri di reazione*

L'equilibrio di reazione per i gas perfetti. Isoterma di reazione e isoterma di Van't Hoff. Variazioni delle funzioni di stato. Equazione di Van't Hoff. Calcolo della composizione all'equilibrio in reazione con resa inferiore al 100%. Equilibri combinati.

Calcolo della costante di equilibrio in reazioni che avvengono in soluzioni ideali di gas reali, e ruolo della pressione totale. Equilibri eterogenei. Equilibri combinati eterogenei.

*Cenni di programmazione.* Gli argomenti trattati verranno anche esemplificati mediante semplici programmi in BASIC e in FORTRAN.

#### *Testi consigliati:*

- P.W. Atkins, "Physical Chemistry", Oxford, University Press.  
J. Bares, C. Cerny, V. Fried, J. Pick, "Collection of Problems in Physical Chemistry", Pergamon Press.  
M.G. Bertoli, M. Mastragostino, "Problemi di termodinamica con risoluzione", Corso (Bologna).  
C. Oliva, "Metodi Numerici", Ed. Tecnos (Milano).  
P. Marazzini, C. Oliva, "Fisica col Computer", Ed. Atlas (Bergamo).

## **21. ESERCITAZIONI DI CHIMICA ORGANICA E DI ANALISI ORGANICA**

PROF. GAETANO ZECCHI, GIOVANNI PALMISANO,  
PAOLA DEL BUTTERO, LUISA GARANTI

Il corso è articolato in due punti fondamentali:

- 1) Verifica sperimentale da parte dello studente di quanto appreso in via teorica nei corsi di Chimica Organica.
- 2) Acquisizione da parte dello studente delle basi teoriche e delle capacità sperimentali necessarie a condurre correttamente le reazioni organiche e a riconoscere i prodotti.

Gli scopi proposti si realizzano rispettivamente attraverso tre distinte fasi di lavoro:

- 1) Esecuzione da parte dello studente di alcune delle più comuni reazioni ricorrenti nelle sintesi organiche: reazioni di sostituzione elettrofila e nucleofila su substrati alifatici e aromatici; reazioni di ossidazione all'atomo di carbonio; reazioni di riduzione di substrati azotati e ossigenati; reazioni di formazione del legame C-C; reazioni di idrazotazione e copolimerizzazione; protezione e deprotezione di gruppi funzionali.
- 2) Sintesi guidate in più passaggi che prevedono l'applicazione critica delle conoscenze acquisite.
- 3) Riconoscimento di sostanze organiche tramite lo studio della loro reattività chimica e preparazione di derivati.

La durata del corso è orientativamente compresa tra i 40 e 45 pomeriggi (4 ore) includendo in tale tempo sia le lezioni teoriche sia le esercitazioni in laboratorio.

## **22. MINERALOGIA CON ESERCITAZIONI PRATICHE**

PROF. ACHILLE BLASI

#### *Introduzione*

La mineralogia: le sue parti e la sua evoluzione storica. Rapporti della mineralogia con la chimica.

### *Stato solido*

Definizione di minerale e di stato solido cristallino. Periodicità dell'edificio cristallino.

### *Cristallografia strutturale*

L'omogeneo periodico mono e bidimensionale. Reticolo tridimensionale. Operazioni di simmetria nel discontinuo (semplici e composte). Gruppi puntuali. Reticoli di Bravis. Gruppi spaziali.

### *Cristallografia morfologica*

Leggi fondamentali. Simboli di facce, spigoli, forme. Descrizione dei sistemi cristallini e delle classi di simmetria. Esame morfologico dei cristallini.

### *Cristallografia a raggi x*

Generalità sui raggi x. Diffrazione dei raggi x nei reticoli cristallini. Equazioni di Laue e di Bragg. Metodologie sperimentali della cristallografia a raggi x: a) metodi a cristallo singolo; b) metodi con polveri.

### *Cristallochimica*

Tipi di legame chimico. Raggi ionici e numero di coordinazione. Regole di Pauling. Cristalli molecolari. Strutture cristalline non molecolari metalliche, covalenti e ioniche. Isomorfismo e soluzioni solide. Interpretazione strutturale dell'isomorfismo. Condizione per la vicinanza fra ioni. Solubilità parziale allo stato solido. Polimorfismo: sistemi monotropici e enantiotropi. Rapporti tra polimorfismo e struttura.

### *Cristallografia fisica*

Proprietà fisiche non direzionali e direzionali. Generalità sulla luce e sui fenomeni luminosi nei mezzi isotropi e anisotropi. Il microscopio polarizzante. Metodi di misura degli indici di rifrazione. Osservazioni in luce parallela e in luce convergente. Polarizzazione rotatoria.

### *Genesi minerali*

Gli ambienti naturali. Distribuzione degli elementi nella litosfera. Nozioni di petrografia, petrologia e giacimenti minerali.

### *Mineralogia sistematica*

Criteri di classificazione dei minerali. Elementi nativi. Solfuri. Alogenuri. Ossidi e idrossidi. Carbonati, nitrati e borati. Solfati, cromati e molibdati. Fosfati. Silicati. Composti organici.

### *Esercitazioni*

Le lezioni sono integrate da esercitazioni pratiche di cristallografia morfologica e strutturale, di ottica cristallografica e di mineralogia descrittiva.

### *Testi consigliati*

A. Bianchi, Corso di Mineralogia (per allievi dei corsi di Laurea in Chimica e Chimica Industriale), XII Ed., CEDAM, Padova (1970).

G. Carobbi, Trattato di Mineralogia (per allievi dei corsi di Laurea in Chimica e Chimica Industriale), XII Ed., CEDAM, Padova (1970).

G. Carobbi, Trattato di Mineralogia (Vol. I e II), Ed., USES, Firenze (1971).

Programma svolto nell'a.a. 89/90

## 23. CHIMICA FISICA II

PROF. MARIO RAIMONDI

### *Introduzione ai metodi statistici*

Concetti statistici fondamentali. Valori medi e distribuzioni probabilistiche. Cammini casuali e distribuzione gaussiana.

### *Descrizione statistica di sistemi di particelle*

Definizione dello stato di un sistema in meccanica classica ed in meccanica quantistica. Sistemi con un numero di particelle dell'ordine di grandezza del numero di Avogadro: trattazione classica e introduzione dello spazio delle fasi; trattazione quanto meccanica. Definizione e studio della funzione densità degli stati.

### *Termodinamica Statistica*

Il teorema di Liouville e la relazione tra i postulati probabilistici fondamentali ed il concetto di equilibrio e di processo reversibile. Processi irreversibili e teorema della mobilità. Insieme statistico rappresentativo. Trattazione statistica della interazione termica di sistemi macroscopici. Equilibrio termico. Temperatura. Entropia. Funzione distribuzione di probabilità. Trattazione statistica della interazione meccanica. Interazioni generalizzate. Collegamento fra leggi termodinamiche e relazioni statistiche: calcolo statistico di quantità termodinamiche. Sistemi in equilibrio con una riserva di calore ed equilibrio canonico. Funzione partizione. Sue proprietà.

### *Applicazioni semplici di meccanica statistica*

Trattazione del gas perfetto. Interpretazione microscopica della equazione di stato. Calcolo dell'entropia mediante la meccanica classica; paradosso di Gibbs ed indistinguibilità. Teorema di equipartizione dell'energia ed applicazioni. Calore specifico dei solidi e modelli di Einstein. Paramagnetismo e trattazione generale della magnetizzazione. Distribuzione di Maxwell delle velocità. Effusione. Pressione come trasporto di momento.

### *Trattazione statistica dell'equilibrio tra fasi ed equilibrio chimico*

Sistemi di miscele di gas. Condizioni di equilibrio generale per sistemi isolati o in contatto con riserve di calore a temperatura costante o a temperatura e pressioni costanti.

Condizioni di stabilità per sostanze omogenee: fluttuazioni di temperatura, di pressione e di densità.

Equilibrio fra fasi. Studio delle isoterme al di sotto del punto critico.

Equilibrio chimico: trattazione statistica delle condizioni di equilibrio e derivazione della espressione della costante di equilibrio in termini delle funzioni partizione molecolari.

Collegamento con la spettroscopia e calcolo della funzione partizione di molecole poliatomiche: calcolo del contributo traslazionale, vibrazionale e rotazionale.

#### *Meccanica statistica quantistica*

Distribuzioni statistiche quantistiche. Statistica di Maxwell-Boltzmann. Statistica di Planck. Statistica di Bose-Einstein. Statistica di Fermi-Dirac. Limite classico delle distribuzioni quantistiche.

Applicazioni e gas quantistici ideali. Problema del corpo nero. Gli elettroni di conduzione dei metalli. Funzione di Fermi e calcolo quantitativo del calore specifico elettronico nei metalli.

#### *Sistemi non ideali*

Solidi: teoria di Debye.

Gas reale: derivazione della equazione di Van der Waals a partire da un potenziale attrattivo approssimato. Equazione dei viriale.

Liquidi: cenni sulla simulazione con tecniche di calcolo basate sulla dinamica molecolare e sul metodo di Montecarlo.

Polimeri: configurazioni delle molecole di polimeri e trattazione della elasticità. Teoria di Flory-Huggins delle soluzioni di polimeri.

#### *Teoria del trasporto*

Tempo di collisione. Libero cammino medio. Sezione d'urto. Viscosità. Calcolo del coefficiente di viscosità per un gas diluito. Calcolo del coefficiente di conducibilità termica. Diffusione. Calcolo del coefficiente di diffusione. Equazione della diffusione. Conducibilità elettrica.

Processi di trasporto e funzione di distribuzione. Equazione di Boltzmann in assenza ed in presenza di collisioni. Formulazione basata sull'integrale di percorso.

Teoria del trasporto più avanzata. Equazioni del "moto" dei valori medi. Soluzioni approssimate della equazione di Boltzmann.

## 24. ESERCITAZIONI DI CHIMICA FISICA II

PROF. LEONARDO FORMARO

PROF. GIAN FRANCO TANTARDINI

### 1. Velocità di Reazione

- a. cinetica chimica

- b. velocità di reazione; equazioni e costanti di velocità; determinazione delle equazioni cinetiche; ordine di reazione; reazioni di ordine zero, uno e due; reazioni di ordine superiore; tempo di dimezzamento
- c. reazioni semplici; dipendenza della velocità di reazione dalla temperatura; reazioni opposte; reazioni consecutive; approssimazione dello stato stazionario; reazioni unimolecolari
- d. determinazione dell'ordine di reazione: metodo dell'integrazione, delle velocità iniziali, metodo dell'isolamento

### 2. Cinetica delle Reazioni Complesse

- a. reazioni a catena: meccanismi, polimerizzazioni, esplosioni
- b. reazioni fotochimiche: efficienza quantistica, separazione isotopica, fotosensibilizzazione
- c. catalisi omogenea e reazioni enzimatiche
- d. autocatalisi, reazioni oscillanti, bistabilità
- e. reazioni veloci: flash fotolisi, metodi di flusso e di riassamento

### 3. Dinamica Molecolare Reattiva

- a. teoria delle collisioni: equazioni, requisiti sterici, reazioni controllate dalla diffusione
- b. teoria del complesso attivato: coordinata di reazione, stato di transizione, formazione e decadimento del complesso attivato, equazione di Eyring, aspetti termodinamici
- c. dinamica delle collisioni molecolari: superficie di energia potenziale, moto sulla superficie, urti reattivi, fasci molecolari.

### 4. Processi su Superfici Solide

- a. struttura delle superfici solide
- b. adsorbimento sulle superfici: fisisorbimento, chemisorbimento, desorbimento, mobilità sulle superfici
- c. isoterme di adsorbimento
- d. catalisi eterogenea
- e. trasferimento elettronico tra adsorbato e metallo
- f. sistemi elettrochimici
- g. reazioni sotto controllo diffusivo e di trasferimento di carica

#### *Testo di riferimento*

"Physical Chemistry" by P.W. Atkins, Oxford University Press, IV ed. 1990

#### *Esperimenti da svolgere in laboratorio*

1. cinetica di alogenazione di chetoni
2. cinetica di tautomeria cheto-enolica

3. cinetica di idrolisi di esteri catalizzata da acidi
4. cinetica di idrolisi di esteri catalizzata da basi
5. cinetica di mutarotazione del glucosio
6. cinetica di trasferimento elettronico e di trasferimento di materia

## 25. METODI FISICI IN CHIMICA ORGANICA

PROF. BRUNO DANIELI

### *I Parte: La Risonanza Magnetica Nucleare*

*Teoria del chemical shift.* Contributo del diamagnetismo locale e della densità elettronica degli atomi vicini. Influenze dei momenti magnetici indotti (anisotropia). Corrente di anello in sistemi ciclici coniugati ad elettroni  $\pi$ . Effetto del campo elettrico. Legame di idrogeno. Composti metallorganici. Effetti del solvente.

*Costanti di accoppiamento spin-spin.* L'interpretazione quantomeccanica dello splitting dei livelli energetici. La costante geminale e la teoria MO nell'interpretazione dell'effetto dei sostituenti. La costante vicinale in sistemi aciclici e ciclici. Il fattore R. Costanti di long-range in sistemi saturi ed insaturi.

*L'influenza della simmetria molecolare e della chiralità sugli spettri di RMN.* Isocronia, diastereotopia, omotopia, e enantiotopia. Analisi di sistemi di spin generati attraverso bande satelliti di  $^{13}\text{C}$  e sostituzione H-D.

*Analisi degli spettri di RMN ad alta risoluzione.* Il formalismo quantomeccanico e l'operatore Hamiltoniano. Calcolo dei sistemi di spin di ordine superiore: AB,  $A_2B$ , ABX, AA'BB'. Spettri con sistemi di spin ingannevolmente semplici. Accoppiamenti virtuali.

*Tecnica ausiliarie nella RMN.* Magneti superconduttori. Esperimento di doppia risonanza. Disaccoppiamento di spin. Disaccoppiamento selettivo e spinickling. Effetto nucleare Overhauser. INDOR. Doppia risonanza eteronucleare. Disaccoppiamento a banda larga.

*La tecnica ad impulsi della RMN e la trasformata di Fourier.* Il problema della sensibilità. Il comportamento di un insieme di nuclei in un campo pulsato. Il rilassamento nucleare. L'esperimento di RMN ad impulsi. I segnali nel dominio del tempo e della frequenza. La trasformata di Fourier. Caratteristiche di uno spettrometro FT-RMN. Gated Decoupling. Meccanismi di rilassamento. Misura dei tempi di rilassamento. Significato strutturale dei tempi di rilassamento. Chemical shift e costanti di accoppiamento per  $^{13}\text{C}$ . Tecniche per l'assegnazione dei segnali. Misure quantitative negli spettri di  $^{13}\text{C}$ . Applicazioni della RMN del  $^{13}\text{C}$  in biosintesi. Moderne sequenze di impulsi.

*Interpretazione degli spettri di  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$  RMN e soluzione di problemi strutturali.* Esempi ed esercizi.

### *Testi consigliati:*

R.J. Abraham e P. Loftus, Proton and Carbon-13 NMR Spectroscopy, an integrated approach, Heyden, London.

H. Gunther, NMR Spectroscopy. An Introduction, John Wiley & Sons Chichester, New York.

F.W. Wehrli, A.P. Marchand e S. Wehrly, Interpretation of Carbon-13 Spectra, John Wiley, Chichester.

### *II Parte: La Spettrometria di Massa.*

*Il processo di ionizzazione delle molecole.* Ionizzazione adiabatica e verticale (principio di Franck-Condon). Le curve di efficienza di ionizzazione. Determinazione dei potenziali di ionizzazione. La distribuzione dell'energia interna dello ione molecolare. Effetto dei sostituenti sul potenziale di ionizzazione.

*La teoria del Quasi-Equilibrio (QET).* Introduzione. Assunzioni fondamentali. L'espressione della costante di velocità. Enumerazione degli stati. Calcolo delle costanti di velocità. Teoria QET modificata. Test sperimentali della QET.

*Applicazione della QET alla Spettrometria di Massa.* Curve di K su E. Energia interna e vita media di uno ione in reazioni competitive di riarrangiamento e di semplice rottura. Distribuzione dell'energia interna tra i frammenti. Determinazione dei potenziali di apparizione. Effetti cinetici. Effetti dei sostituenti nelle reazioni di frammentazione. Ioni metastabili: origine e rilascio dell'energia. Processi di collisione.

*Meccanismi di frammentazione.* Stabilità dei prodotti e forza di legame. Regola di Stevenson. Localizzazione della carica positiva e del centro radicalico. Formalismo di McLafferty per la scrittura dei meccanismi di reazione: rotture  $\alpha$ , ed i. Riarrangiamenti di idrogeno ad atomi saturi ed insaturi, specifici e non specifici. Riarrangiamento con spostamento. Riarrangiamenti di ioni ad incipiente carica radicalica.

*La frammentazione delle sostanze organiche.* Studio del comportamento di idrocarburi saturi, insaturi, aciclici, ciclici, aromatici. Alcoli ed eteri. Ammine. Composti carbonilici. Nitrili. Nitroderivati. Tioli e tioeteri. Alogenoderivati.

*L'interpretazione degli spettri di massa e la soluzione di problemi strutturali.* Esempi ed esercizi.

*Metodi per la delucidazione dei meccanismi delle reazioni ioniche in Spettrometria di Massa.* Marcatura isotopica, Blocco sterico. Ioni metastabili. Effetti isotopici. L'interazione di gruppi funzionali in rotture apparentemente dirette di legami.

*Aspetti sperimentali della Spettrometria di Massa.* Metodi "soft" di ionizzazione. L'accoppiamento GC-MS. Determinazione della composizione degli ioni attraverso HR-MS. Analizzatori magnetici, a quadrupolo, a tempo di volo, a ciclotrone. Strumenti controllati da microprocessore.

*Testi consigliati:*

F.W. McLafferty, *Interpretation of Mass Spectra*, 2<sup>a</sup> ed., Benjamin Eds., London.

M.E. Rosé e R.A.W. Johnstone, *Mass Spectroscopy for Chemistry and Biochemists*, Cambridge University Press, Cambridge.

## 26. CHIMICA DEI COMPOSTI DI COORDINAZIONE

PROF. SECONDO MARTINENGO

Generalità sui composti di coordinazione. Tipi di leganti, stereochimica, tipi di isomeria. Metodi di preparazione, caratterizzazione e reattività. Stabilità. Complessi labili ed inerti. I metalli di transizione nella chimica dei composti di coordinazione. Richiami della teoria del campo dei leganti. Complessi ad alto e basso spin. Cenni della teoria degli orbitali molecolari. Meccanismi di reazione nei complessi dei metalli di transizione. Complessi con legame metallo-idrogeno. Complessi dei metalli di transizione con leganti  $\pi$ -accettori. L'ossido di carbonio come legante. Carbonillogenuri. Metallo carbonili mononucleari e polinucleari a cluster. Anioni metallo carbonilici. Metodi di sintesi dei carbonili. Metodi di separazione. Caratterizzazione strutturale in solido ed in soluzione. Reattività: reazioni di riduzione, di ossidazione e di sostituzione. Descrizione dei principali composti. Applicazioni dei composti di coordinazione in catalisi omogenea.

L'insegnamento prevede anche un corso integrativo dal titolo "CATALISI OMOGENEA E SUE APPLICAZIONI INDUSTRIALI" tenuto dal Dott. CORRADO CROTTI, che costituisce materia d'esame.

*Test di consultazione:*

F.A. Cotton and G. Wilkinson, "Advanced Inorganic". Chemistry, Fifth Edition.

## 27. CHIMICA DEI COMPOSTI ETEROCICLICI

PROF. GIORGIO PAGANI

Questo corso si propone di fornire, oltre ai fondamenti di chimica eterociclica da applicare nell'esercizio della comune sintesi organica, anche i metodi per

pianificare strategie di sintesi sia di quei composti eterociclici usati nell'industria della chimica fine e secondaria (farmaci, intermedi per industria farmaceutica, antiparassitari, fitofarmaci, additivi, ecc.), sia di sistemi eterociclici presenti in alcune classi di composti naturali (alcaloidi, antibiotici, ecc.).

*Generalità*

Nomenclatura degli eterociclici. Eteroaromaticità: definizione termodinamica ed reazionale. Eterocicli elettronricchi ed elettronpoveri. Orbitali molecolari degli eterocicli.

Combinazione lineare di O.M. di subunità. Reattività degli eterocicli agli elettrofili nell'ambito degli O.M. di frontiera. Teoria degli acidi e basi duri e molli. Distribuzione elettronica, equazione di Klopman, controllo di carica e di frontiera, selettività  $\alpha/\beta$  negli eterocicli pentaatomici.

Tautomeria negli eterocicli. Metodi fisici per lo studio degli equilibri. Fattori che governano la formazione dei cicli. Reazioni di condensazione e di cicloaddizione dipolari. Teoria generale delle reazioni di cicloaddizione dipolare nell'ambito delle reazioni pericicliche. Potenzialità sintetiche. Reazioni cheletropiche. Reazioni elettrocicliche. Richiamo e cenno sulle reazioni sigmatropiche. Reazioni termicamente e fotochimicamente permesse o proibite.

*Eterociclici pentaatomici monoetero.*

Furano, Pirolo, Tiofene. Sintesi (da composti 1, 4 -dicarbonilici, secondo Knorr, secondo Hantzsch, secondo Feist, da carbonidrati, da acetileni, da composti  $\beta$ -dicarbonilici, per conversione di altri eterociclici).

Benzofurano, Indolo, Benzotiofene. Sintesi (da derivati arilossi, arilamino, ariltioacetici, da  $\alpha$ -alogenochetoni secondo Bischler, secondo Fischer, secondo Reissert, secondo Madelung, varie).

Reattività: perdita di aromaticità (riduzione, ossidazione, apertura idrolitica dei derivati furanici con formazione di acido levulinico e reazioni correlate, ac. mucoclorico, acido mucobromico, cloromalondialdeide, nitromalondialdeide, cicloaddizioni, addizione di carbeni, allargamento dell'anello pirrolico a piridinico). Metalloderivati di pirrolo, indolo, tiofene, benzotiofene (reazioni con elettrofili, alchilazioni). Sostituzioni elettrofile, effetto dei gruppi presenti sull'anello (nitrazione, solfonazione, alogenazione, alchilazione, acilazione, mercuriazione, nitrosazione, copulazione, reazioni di Mannich, eliminazione sostituenti dall'anello). Conversione anello furanico in pirrolico e piridinico.

Riduzione, ossidazione. Derivati funzionalizzati: sostituzioni nucleofile, pirrometeni, porfirinogeno. Idrossiderivati (tautomerie relative, angelicalattoni), ossindolo e indossile (sintesi). Indaco, leucoindaco, isatina, acido isatico, coloranti e pigmenti.

Derivati naturali (triptofano, acido lisergico, alcaloidi, bilirubina, porfirine, aromaticità, clorofille, emina, complessi metallici).

*Azine*

Piridina. Sintesi dell'anello (ald. gluconica, di Hantzsch e derivate, da composti 1, 5-dicarbonilici, di Guareschi, alchilpiridine, da derivati furanici, piranici, altre). Sintesi Vitamina B<sub>6</sub>. Derivati naturali (NAD, nicotina e derivati). Piridi-

na, suo N-ossido e derivati quaternari: ossidazione, riduzione (derivati piridinici ridotti, preparazioni e proprietà). Piridazina. Sintesi dell'anello (da an. maleica, altre). Pirimidina. Sintesi dell'anello (da amidine, uree, tiourae, e composti 1, 3-dicarbonilici come tali o potenziali). Pirazina. Sintesi dell'anello (da  $\alpha$ -alogenoacetali, da composti  $\alpha$ -ammino carbonilici). Triazina simmetrica. Sintesi e proprietà di alcuni derivati. Cloruro di cianurite. Chinolina e Isochinolina. Metodi di sintesi dell'anello (sintesi di Skraup, di Doebner-Müller, di Friedländer, sintesi di Bischler, di Pictet, di Pomeranz-Fritsch). Cenni sulla sintesi di acridina, cinnolina (sali di o, acilbenzodiazonio), chinossaline (da o. fenilendiammine), chinazoline (da ac. antranilico).

Reattività delle azine. Reazioni di sostituzione elettrofila su piridina, diazine, chinolina, isochinolina.

Reazioni di sostituzione elettrofila su N-ossidi di piridina, chinolina isochinolina. Reazioni di nucleofili con le azine: reazioni di somma-eliminazione e di eliminazione-somma. Il 2, 3- e il 3, 4-piridino. Reazioni di nucleofili con derivati degli N-ossidi di piridina, chinolina, isochinolina. Sali di azinio: azione dei nucleofili. Controllo di carica e di frontiera nella regiochimica: apertura degli anelli. Reazioni di Reissert e analoghe su N-ossidi.

Azine funzionalizzate: reazioni delle funzioni e reattività da queste conferite all'anello. Gruppi alchilici (acidità, basi quaternarie, anidrobasi, condensazioni, alogenazione, reazioni di Micheal), cianine. Alogenoderivati (sostituzioni nucleofile), idrossiderivati (tautomeria, natura ambidentata, elettrofile, all'anello, alcossiderivati). Amminoderivati (sintesi, acilazione, diazotazione). Acidi carbossilici (sintesi, comportamento termico). Cicloaddizioni.

Trasposizione degli N-ossidi. Reazioni radicaliche. Alcune classi di derivati naturali di particolare rilievo: basi pirimidiniche negli acidi nucleici. NAD. Alcuni alcaloidi della serie chinolinica e isochinolinica.

Sali di pirilio, sintesi, Pironi (ac. deidroacetico, isodeidroacetico), cumarina, cromoni, flavoni, antociani, conversione in piridoni, aromaticità.

#### *Eterocicli pentatomici di- e polietero*

Imidazolo, Ossazolo, Tiazolo e relativi Benzocondensati. Sintesi (da  $\alpha$ -aminochetoni, da  $\alpha$ -alogenochetoni sec. Hantzsch, da derivati idrogenati, sintesi termini fondamentali, imidazolo e tiazolo). Basicità, derivati quaternari, reazioni di apertura. Sostituzioni e elettrofile (nitrazione, alogenazione, acilazione, copulazione). Metallazione. Sostituzioni nucleofile. Ossidazioni e riduzioni.

Imidazoloni, tiazolidoni, ossazoloni. Idantoina. Reazioni delle funzioni (amminogruppi, alchili, tioli). Vitamina B<sub>1</sub> (sintesi e trasformazioni). Cicloaddizioni.

Purine (sintesi e proprietà). Prodotti naturali (acido urico, caffeina, teofillina, teobromina, xantina, ipoxantina, adenina, guanina, ATP, acidi nucleici). Vitamina B<sub>2</sub>.

Isossazolo, Pirazolo. Sintesi (da composti  $\beta$ -dicarbonilici, da inoni, enoni ed equivalenti), per cicloaddizione (regio- e stereochimica delle cicloaddizioni 1, 3-dipolari, nitroossidi e nitrilimine e sintesi loro precursori, da diazocomposti, cenni acido fulminico), sostituzioni elettrofile, nucleofile. Metallazioni, aperture anello isossazolico. Riduzione, ossidazione. Pirazoloni (sintesi e reattività), isossazoloni.

1, 2, 3-, 1, 2, 4-, Triazoli e Tetrazoli. Sintesi (da aciltiosemicarbazidi e correlate, per cicloaddizione da azidi, varie). Acidità (acid. dell'azoto nella serie azolica). Sali di tetrazolio, derivati formazilici.

#### *Eterocicli tri- e tetra-atomici*

Aziridine e ossirani. Sintesi dell'anello e reazioni di apertura. Ossetano, Tietano, Azetidina. Sintesi dell'anello. Reazioni di apertura. Penicilline. Cefalosporine (cenni).

Gli Eterocicli quali sintoni nella sintesi organica.

#### *Testi di consultazione:*

Fusco, Bianchetti, Rosnati, "Chimica Organica", 2° vol.  
M.H. Palmer, "The Structure and Reactions of Heterocyclic Compounds", E. Arnold, London.  
A.R. Katritzky, "Handbook of Heterocyclic Chemistry", Pergamon OPress, 1985.

Per questo insegnamento è previsto un Corso Integrativo dal titolo "I radicali in chimica eterociclica", tenuto dal prof. V. Malatesta, il cui programma (che costituisce materia d'esame) sarà reso noto nel corso delle lezioni.

## 28. CHIMICA DELLE SOSTANZE ORGANICHE NATURALI

PROF. PAOLO MANITTO

Metabolismo primario e secondario.

Metodi di indagine nello studio della biosintesi delle sostanze naturali. Uso dei radioisotopi.

Aspetti stereochimici delle reazioni enzimatiche.

Polichetiti. Naftochinoni e antrachinoni. Antibiotici.

Terpeni. Classificazione. Regola isoprenica strutturale. Regola isoprenica biogenetica, Isoprene attivo. Acido mevalonico ed emiterpeni. Monoterpeni cicloesaici ed iridoidi. Sesquiterpeni. Diterpeni. Triterpeni. Carotenoidi.

Trasformazione del lanosterolo in colesterolo. Steroidi naturali. Fitosteroli. Veneni cardiaci. Saponine. Ormoni degli insetti. Corticosteroidi. Progestinici. Androgeni. Estrogeni.

Metaboliti dell'acido schichimico. Biosintesi degli amminoacidi aromatici.

Derivati della fenilalanina via acido cinnamico. Fenilpropanoidi. Lignani. Lignine. Neoflavonoidi. Isoflavonoidi.

Pigmenti pirrolici. Porfirine. Clorofille. Pigmenti biliari.

#### *Testi consigliati:*

J. Mann, *Secondary Metabolism*, Clarendon Press, Oxford, 1978.  
R.H. Thomson, *The Chemistry of Natural Products*, Blackie, London, 1985.  
P. Manitto, *Biosynthesis of Natural Products*, Ellis Horwood, Chichester, 1981.



P. Manitto, *Fondamenti di stereochimica per lo studio delle sostanze naturali*, CLUED, 1981.

## 29. CHIMICA ORGANICA APPLICATA PROF. UMBERTO VALCAVI

### Introduzione

Vengono descritte le reazioni di chimica organica più usate sia in laboratorio che in processi industriali, con particolare riguardo per le reazioni di più recente scoperta e per le reazioni più stereoselettive od enantioselettive. Le reazioni sono state suddivise in sei categorie:

- reazioni di protezione di gruppi funzionali;
- reazioni di riduzione;
- reazioni di ossidazione;
- reazioni di demolizione;
- reazioni di riarrangiamento molecolare;
- reazione di condensazioni con allungamento di 1, 2, 3, o più carboni.

Per ogni reazione vengono descritte lo scopo e l'utilità, il meccanismo di reazione, le principali reazioni collaterali e le condizioni sperimentali.

### Testi suggeriti:

U. Valcavi, *Dispense di Chimica Organica Applicata*, 2 volumi, edito dalla CLUED 1982-1983.

L.F. Fieser, M. Fieser, *Reagents for Organic Synthesis*, J. Wiley, New York, volumi 1 → 34.

Da consultare, *Organic Reactions*, J. Wiley, New York, volumi 1 → 34.

### 1) Reazioni di protezione di gruppi funzionali

Protezione di doppi legami olefinici, di tripli legami acetilenici, di gruppi alcolici, di ammine, di carbossili, di carbonili.

Cenni sull'uso dei processi su supporto solido nelle sintesi delle proteine e dei polinucleotidi.

Cenni sull'uso della "computer chemistry".

### 2) Reazioni di riduzione

2a) Idrogenazioni e deidrogenazioni.

Idrogenazioni catalitiche: meccanismo di reazione, catalizzatori usati.

Idrogenazioni di olefine, di acetilenici, di carbonili, di carbossili, di immunoderivati, di altri gruppi funzionali.

Idrogenazioni con catalizzatori e con chinoni.

Reazioni di aromatizzazione e riarrangiamento dienone-fenolo.

2b) Riduzioni con idruri metallici.

Vari idruri metallici usati in chimica organica.

Riduzioni con idruro di litio ed alluminio, con diisobutil-alluminio idruro, con triterbutossi-litio-alluminio idruro, con sodio boro idruro, con altri idruri del boro e con litio e potassio selectride, con idruri otticamente attivi.

Reazioni di idroborazione: meccanismo, selettività, reazioni ottenibili. Idroborazioni asimmetriche.

Reazioni enzimatiche e con "Chemzymes".

Reazioni di ossimercuriazione.

2c) Altre reazioni di riduzione.

Riduzioni con iridio tricloruro, con metalli alcalini.

Riduzioni di carbonili secondo Clemmensen, Wolff-Kishner, tramite tiocetali.

Riduzioni di carbonili ad alcoli secondo Meerwein-Ponndorf-Verley, ed ossidazione di alcoli secondo Oppenauer.

### 3) Reazioni di ossidazione

Ossidazioni con acido cromico, con permanganato di potassio, con acido periodico, con piombo tetra-acetato, con sodio metabismutato.

Ossidazioni con dimetilsolfossido e reazioni collegate.

Ossidazioni con tetrossido di osmio, secondo Prevost e secondo Woodward, secondo Baeyer-Villiger.

Reazioni ottenibili con peracidi organici e con acqua ossigenata. Sintesi degli epossidi e reazioni degli epossidi.

Altre reazioni di ossidazione (con polorito, con sali di tallio).

### 4) Reazioni di demolizione

Reazioni di demolizione secondo Hoffmann, Curtius, Schmidt, Barbier-Wieland.

Demolizioni secondo Hunsdiecker, secondo Ohno, Barbier-Wieland modificate, retro-Claisen e retro-Michael.

### 5) Reazioni di riarrangiamento molecolare

Riarrangiamenti termici: sigmatropici, secondo Serni, circoambulatori.

Riarrangiamenti utalizzati da acidi: secondo Wagner-Meerwein, secondo Westphalen, riarrangiamento backbone, secondo Demjanov e secondo Demjanov-Tiffenau, secondo Beckmann, riarrangiamento indolico di Fischer e secondo Pummerer.

Riarrangiamenti catalizzati da alcali: riarrangiamento benzilico, secondo Favorsky, secondo Willgerodt, secondo Neber e secondo Smiles.

### 6) Reazioni di condensazione

6a) Condensazioni che addizionano un atomo di carbonio.

Reazioni con ilidi, con composti organometallici, addizioni mediante l'uso di anidride carbonica, di acido cianidrico, di formaldeide e reazioni secondo Prins e secondo Mannich.

Reazioni con fenil-tiometil-litio, con tosilmetilisocianuro.

Reazioni secondo Darzens con diazoalcani e secondo Arndt-Eistert.

6b) Condensazioni che addizionano due atomi di carbonio: condensazioni con acetiluri e reazioni collegate.

Reazioni con vinil-eteri, cin etil-etiniletere.

Condensazione secondo Reformatsky e secondo Witting.

Sintesi malonica, acetacetica, con acido succinico, con 2,4-dimetiltiazolo.

Condensazione aldolica e crotonica, secondo Knoevenagel, secondo Claisen e Dieckmann.

6c) Condensazioni che aggiungono tre o più di tre atomi di carbonio: condensazione secondo Mannich e reazioni collegate, condensazioni secondo Stobbe e secondo Michael.

6d) Condensazioni varie: condensazione aciloinica, benzoinica, secondo Diels-Alder.

Sintesi di olefine, di aldeidi e chetoni.

Sintesi di composti aliciclici e sintesi di composti ciclopropanici.

Reazioni di alchilazione e di alogenazione.

### 30. STRUTTURISTICA CHIMICA

PROF.SSA MIRELLA SANSONI

Proprietà di gruppo. Reticoli e spazi vettoriali. Operazioni di simmetria. Gruppi di simmetria puntuali e spaziali. Sistemi cristallini. I cristalli come disposizione ordinata di oggetti atomici. Reticolo cristallino. Cella elementare.

Diffrazione dei raggi X da parte dei cristalli

- 1) Produzione, assorbimento, e diffusione dei raggi X
- 2) Trasformata di Fourier: sovrapposizione di onde, fase ed ampiezza risultante; spazio reale e spazio reciproco; diffusione di onde da parte di oggetti; ampiezza e fase della trasformata. Trasformata di un atomo e fattore differenziale atomico. Trasformata di 2, 4, 6 atomi (manubrio, quadrato, esagono): valutazione geometrica della trasformata, sue caratteristiche. Trasformata di raggruppamenti semplici e fattori di struttura.
- 3) Trasformata di un cristallo: la funzione di diffrazione reticolare; le equazioni di Laue; fattore di struttura; spazio reciproco e reticolo reciproco; equazione di Bragg; geometria della diffrazione da parte dei cristalli.
- 4) Tecniche diffrattometriche: metodo a polveri; metodo a cristallo singolo; geometria Weissenberg e a precessione; diffrattometrico automatico.
- 5) Il problema della fase: metodi diretti e serie di Patterson. Metodi di affinamento dei parametri strutturali.
- 6) Analisi dei risultati: conformazione molecolare, distanze e angoli intra- e intermolecolari, accuratezza dei dati.

Il Corso consiste di circa 70 ore di lezione più alcune esercitazioni pratiche e di calcolo con cristallo singolo (a) e con polveri (b).

(a) Con metodo Weissenberg o a precessione, determinazione della cella reale e del gruppo cristallografico.

Analisi di mappe Patterson per strutture con atomi pesanti e determinazione delle coordinate di posizione in cella.

(b) Analisi numerica per la determinazione strutturale: indicizzazione a determinazione della cella unitaria; profile fitting; metodi ab initio; affinamento tipo Rietveld.

Testi consigliati

J.P. Glusker, K.N. Trueblood, *Crystal structure analysis A primer* Oxford Univ. Press

G.H. Stout, L.H. Jensen, *X-ray structure determination. A Practical Guide* The Mac Comp.

Azaroff, *Elements of X-ray Crystallography* McGraw-Hill

### 31. CHIMICA FISICA ORGANICA

PROF. DEMETRIO PITEA

PARTE GENERALE - *Modello della particella nella scatola*. Suo utilizzo per la soluzione di problemi chimici: calcolo di energia elettronica, energia di transizione, distribuzione elettronica ed energia di delocalizzazione in polieni lineari e ciclici. *Principi costruttivi dei diagrammi di correlazione* di funzioni d'onda, di configurazioni e di stati. Regola di "no-crossing".

GLI ATOMI

*Atomi idrogenoidi*. Autovalori ed autofunzioni (parte radiale e parte angolare), loro forma e significato fisico.

*Atomi polielettronici*. Modelli approssimati per la soluzione dell'equazione di Schrödinger: *metodo del campo centrale*, *metodo variazionale*, *metodo perturbativo*: loro applicazione allo studio dello stato fondamentale dell'atomo di elio, confronto dei risultati e limiti di applicabilità.

*Variabile di spin* e spinorbitali. Sistemi di particelle identiche e principio di antisimmetria. Funzione d'onda di sistemi polielettronici e determinate di Slater. Funzioni d'onda plurideterminanti. Sviluppo dei modelli approssimati: il *metodo di Hartree-Fock* o del campo autoconsistente (SCF); derivazione formale dell'eq di HF, interpretazione degli autovalori SCF, energia elettronica totale SCF, stato fondamentale dell'atomo di elio. Forme analitiche delle funzioni atomiche (STO e GTO). Sistema periodico. Ibridizzazione degli AO.

LE MOLECOLE

*Approssimazione di Born-Oppenheimer* e sue conseguenze. Molecole a legami localizzati. Metodo degli orbitali molecolari (MO-LCAO). Molecola-ione idrogeno. Molecole biatomiche omonucleari: integrali di sovrapposizione, modelli di costruzione da orbitali idrogenoidi e da orbitali di simmetria. Diagramma di correlazione modello atomo unito - modello atomo separato. Molecole biatomiche eteronucleari. Molecole poliatomiche. *Metodo del legame di valenza (VB)*. Molecole biatomiche omonucleari ed eteronucleari. Carattere ionico dei legami. Energia di risonanza ionica e suo calcolo.

*Molecole a legami delocalizzati. Approssimazione  $\sigma$ - $\pi$ .*

*Metodo VB. Strutture e funzione d'onda, regola di Rumer, energie di risonanza empirica e verticale.*

*Metodi MO-LCAO. Metodo di Hückel semplice (HMO-LCAO): energia e coefficienti degli MO, densità elettronica, carica netta, ordine di legame, energia di delocalizzazione. Orbitali di simmetria. Problemi applicativi. Proprietà di sistemi particolari: polieni lineari, polieni monociclici planari, idrocarburi alternanti.*

*Esame critico del metodo HMO: significato degli integrali coulombiani e di scambio; introduzione dell'integrale di sovrapposizione, tecnica  $\omega$ .*

*Estensione del metodo HMO ai sistemi eterociclici: calcolo del parametro coulombiano e di scambio. Iperconiugazione.*

*Metodo perturbativo: approssimazione del primo ordine (variazione dell'energia di un MO) e del secondo ordine (variazione dell'energia totale). Utilizzo dei diagrammi di correlazione. Polarizzabilità.*

*Cenni sui metodi MO semiempirici e sui metodi ab-initio.*

## CINETICA CHIMICA

*Aspetti teorici. Teoria dello stato di transizione. Costruzione delle superfici di energia potenziale per reazioni semplici. Correlazione di grandezze teoriche con grandezze sperimentali.*

*Reazioni in soluzione. Formulazione termodinamica della velocità di reazione. Significato dei termini entalpici ed entropici. Controllo termodinamico e controllo cinetico dei prodotti di reazione.*

*Confronto di reattività tra sistemi simili. Relazione isocinetica. Scelta delle grandezze sperimentali adatte per il confronto con grandezze teoriche. Postulato di Hammond.*

*Il metodo perturbativo nello studio della reattività. Reazioni di cicloaddizione: stereospecificità e selettività. Studio teorico. Aspetti qualitativi. Aspetti quantitativi. Teoria PMO e reazioni di Diels-Alder.*

### Testi consigliati

- [1] P.W. Atkins, "Physical Chemistry", Oxford University Press, 1987.
- [2] P.W. Atkins, "Solution Manual for Physical Chemistry", Oxford University Press, 1986.
- [3] P.W. Atkins, "Molecular Quantum Mechanics", Oxford University Press, 1986.
- [4] P.W. Atkins, "Solution Manual for Molecular Quantum Mechanics", Oxford University Press, 1986.
- [5] P. Beltrame in "Chimica Fisica", ed. M. Simonetta, Manfredi, 1966.
- [6] I. Fleming, "Frontier Orbitals and Organic Chemical Reactions", J. Wiley, 1976.
- [7] M.W. Hanna, "Quantum Mechanics in Chemistry", W.A. Benjamin, 1969.
- [8] E. Heilbronner, H. Bock, "The HMO-Model and its Application. Basis and Manipulation", J. Wiley, 1975.
- [9] E. Heilbronner, H. Bock, "The HMO-Model and its Application. Problems with solutions", J. Wiley, 1976.

[10] J.P. Lowe, "Quantum Chemistry", Academic Press, 1973.

[11] A. Streitwieser, "Molecular Orbital Theory for Organic Chemistry", J. Wiley, 1961.

*Parte generale: Rif. 8, Cap. 1.*

*Gli atomi: Rif. 1, Cap. 15; Rif. 3, Cap. 9; Rif. 7, Cap. 5; Rif. 9, Cap. 2; Rif. 10, Cap. 4, 5, 7, 12, 14.*

*Le molecole: Rif. 1, Cap. 16; Rif. 3, Cap. 10; Rif. 7, Cap. 7; Rif. 9, Cap. 3-9, Rif. 10, Cap. 8; Rif. 11, Cap. 2-10.*

*Cinetica chimica: Rif. 1, Cap. 30; Rif. 5, Cap. II, II; Rif. 6, Cap. 2, 4.*

Per questo insegnamento è previsto un corso integrativo dal titolo "Relazioni attività-struttura in molecole di interesse biologico", tenuto dal prof. Vincenzo Rizzo, il cui programma dettagliato (che costituisce materia d'esame) verrà reso noto nel corso delle lezioni.

## 32. CHIMICA ORGANICA SUPERIORE

PROF. FRANCESCO SANNICOLÒ

### Stereochimica

*Stereochimica statica. Elementi di simmetria. Operazioni di simmetria. Chiralità e stereogenicità.*

*Stereoisomeria: enantiomeri e diastereoisomeri, stereoisomeri configurazionali e conformazionali. Composti con più elementi di stereogenicità, "pseudo-asimmetria".*

*Proprietà chirotiche: Attività ottica. Birifrangenza circolare. Dicroismo circolare. Achiralità stocastica. Criptochiralità.*

*Prochiralità: Classi di prochiralità. Gruppi e facce enantiotopici e diastereotopici. Prostereogenicità.*

*Designazioni di configurazione assoluta.*

*Conglomerati, racemati e soluzioni solide racemiche. Formazione di racemi. Racemizzazione. Epimerizzazione.*

*Metodi di produzione di composti otticamente attivi: separazione fisica, risoluzione classica e risoluzione spontanea di racemi. Risoluzione cinetica. Sintesi e distruzione asimmetrica. Riconoscimento enantiomerico e interazioni antipodali. Modelli di stereoselezione.*

*Criteri di purezza enantiomerica e diastereomerica.*

*Metodi fisici e chimici di assegnazione della configurazione assoluta.*

### Correlazioni di energia libera

*Deduzione teorica, significato e limiti delle equazioni di correlazione di energia libera. Correlazioni di reattività e variazioni strutturali del substrato: equazioni*

di Hammett e Taft. Correlazioni di reattività e nucleofilia: equazione di Swain-Scott. Correlazioni di acidità termodinamica e cinetica: equazione di Dronsted.

#### Meccanismi di reazione

Carbanioni: metodi di produzione e di valutazione della stabilità. Struttura e stabilità configurazionale dei carbanioni. Carbanioni stabilizzati dallo zolfo (S, SO, AO<sub>2</sub>).

Sostituzioni elettrofile all'atomo di carbonio saturo: effetti della struttura del substrato, del gruppo uscente, del solvente; andamento stereochimico.

Carbocationi: metodi di valutazione della stabilità. Sostituzioni nucleofile all'atomo di carbonio saturo. Effetti della struttura del substrato, del gruppo uscente, del solvente. Solventi protici e aprotici dipolari. Forza ionica del mezzo. Solvatazione specifica. Partecipazione del gruppo vicinale e assistenza anchimerica. Sostituzioni nucleofile aromatiche: bimolecolare, monomolecolare, eliminazione - addizione, addizione - eliminazione, via radicali - anioni; attacco al gruppo uscente, addizione - apertura - chiusura d'anello in serie eterociclica.

#### Testi consigliati

K. Mislow, "Introduction to stereochemistry", W.A. Benjamin Ed. 1966.

J. Jacques, A. Collet, S.H. Wilen, "Enantiomers, racemates and resolutions", John Wiley & Sons, 1981.

P. Deslongchamps, "Stereochemical effects in organic chemistry", Pergamon Press, 1983.

Y. March, "Advanced organic chemistry; reaction, mechanisms and structure", II edition McGraw Hill, 1977.

### 33. ELETTROCHIMICA ORGANICA CON ESERCITAZIONI

PROF. GIORGIO FIORI

#### Parte I - I sistemi elettrochimici

1. Concetti fondamentali di elettrochimica.
2. Metodi elettrochimici impiegati in Elettrochimica Organica.
3. Aspetti sintetici e meccanicistici delle reazioni di elettrodo di composti organici classificate secondo di gruppi funzionali coinvolti.
  - a riduzioni
  - b ossidazioni
4. Reazioni di elettrodo classificate per tipo di reazione: accoppiamenti riduttivi e ossidativi, rottura di legami, formazione di legami, sostituzioni anodiche.
5. Descrizione delle principali elettrosintesi industriali.
6. Produzione e impiego di composti organici conduttori di prima e di seconda specie.

#### Testo di consultazione

M.M. Baizer, H. Lund, *Organic Electrochemistry, an introduction and a guide*. M. Dekker Inc. New York (1983).

### 34. ESERCITAZIONI DI TECNICA E SINTESI SPECIALI ORGANICHE

PROF. CARLO SCOLASTICO

#### Parte I - (35 ore)

##### Formazione dei legami singoli

Sintesi e reazioni di carbanioni  $\alpha$ -eterosostituiti. Ichilazione. Alchenilazione ed arilazione di gruppi metilenici attivi.  $\alpha$ -Anioni di carbossilati ed esteri.  $\gamma$ -alchilazione e  $\gamma$ -arilazione di composti 1,3-dicarbonilici. Alchilazione di  $\beta$ -chetosolfossidi e  $\beta$ -chetosolfoni. Alchilazione e reazione di  $\alpha$ -fenilsolfonil esteri  $\beta$ -fenilsolfonil-acidi; -fenilsolfonilchetoni ed aldeidi. Arilazione di chetoni. Alchilazione di chetoni.

Alchilazione erantioselettive. Ilidi dello zolfo. ciclopropil ilidi solforati: applicazione alla sintesi come nuovi metodi di alchilazione. Stereochimica della alchilazione dei chetoni ciclici. Addizione coniugata di composti organometallici. Reazioni di sostituzione mediante reagenti di organo-rame. Acilazione nucleofila. Metodi diretti (via radicalica, via organometallica). Equivalenti classici dell'anione acile (cianuri, acetiluri, anioni nitronato). Funzioni carboniliche mascherate: metalo aldimmine, anioni di cianidrine protette. La funzione carbossilica nella acidazione nucleofila. 1,3-ditiani e 1,3 ditioacetali. Ditioacetali dei chetoni. Ticacetali monosolfossidi. Derivati metallici degli eoli. Acilanioni vinilloghi mascherati.

Reazioni delle enammine. Reazione di idrocianazione. Sintesi di 1,5-dieni da composti allilici.

#### Parte II (35 ore)

##### Formazione dei doppi legami c-c

La reazione di Wittig: ilidi del fosforo. Horner-Wittig: fosfonati. Stereochimica della reazione di Wittig modificate. Applicazioni particolari della reazione di Wittig: sintesi di vinilcheti e vinilsolfuri, reazioni con composti funzionalizzati non carbonilici e Wittig intramolecolari.

Fosfor-bis-N, N-dialchilammidi e solfinammidi.

Reazione di Wittig e Horner-Wittig in trasferimento di fase e con eteri corona. Olefine da addizione e trasposizione. Sintesi stereoselettiva di etileni di-tri e tetra-sostituiti (da composti acetilenici, da alchil propargilici, da esteri propargilici, da acetati allilici, da ciclopropil-carbinoli).

Sintesi di olefine con l'impiego di composti organici del boro e dell'alluminio: alchilborati, alchenilborati ed alchenilborani, esteri ed acidi alchenilboranici,

alchenilalani, alchenilalanati. Sintesi di olefine con l'impiego di composti organici del silicio. Reazioni di eliminazione di organosilani  $\beta$ -funzionalizzati. Sintesi di olefine funzionalizzate da composti acetilenici.

Sintesi di olefine per reazioni di riassetamento. Olefine per accoppiamento riduttivo dei carbonili, per riduzione di dioli e di epossidi, per dealogenazione dei dialogenuri vicinali.

Formazione di olefine per decomposizione di *p*-toluen-solfonilidrazioni. Olefine per decarbossilazione ossidativa di acidi carbossilici.

Riassetamento di Claisen di allilvinil esteri. Reazioni dei composti di  $\pi$ -allil nichel e  $\pi$ -allil paladio.

I carbeni nella sintesi organica.

Aldoliche direzionale, stereoselettive ed anantioselettive.

#### Libri di testo:

L. Colombo, C. Gennari e C. Scolastico, "Tecniche e sintesi speciali organiche", Vol. I e Vol. II, CLUED 1978 e 1979.

W. Carruthers, "Some modern methods of organic synthesis", II Ed. '78, Cambridge University Press.

Per questo insegnamento è previsto un corso integrativo dal titolo "Chimica delle biotecnologie", tenuto dal prof. Federico Arcamone, il cui programma dettagliato (che costituisce materia d'esame), verrà reso noto nel corso delle lezioni.

## 35. CHIMICA DELLE FERMENTAZIONI

PROF.SSA BIANCA MARIA RANZI IN LEBANO

### 1) Cenni di microbiologia generale

Procarioti ed eucarioti: morfologia e struttura.  
Tassonomia, nutrizione, riproduzione e crescita dei microorganismi.  
Metabolismo primario e secondario e sua regolazione.

#### Testi:

Sistrom, "Vita dei microbi", Zanichelli.  
Stanier, Ingraham, Wheelis, Painter, "The microbial world", Prentice Hall.  
Lehninger, "Principi di Biochimica", Zanichelli.  
Karlson, "Biochimica", Manfredi.

### 2) Fermentazioni anaerobiche: biosintesi e tecnologia

Fermentazione alcoolica, lattica (omo ed eterofermentante), butirrica, acetobutilica, propionica, acidomista.

#### Testi:

Doelle, "Bacterial metabolism", Academic Press.

### 3) Fermentazioni aerobiche: biosintesi e produzione industriale

Acidi organici: acido citrico, acido acetico.  
Aminoacidi: acido glutammico.

Vitamine: vitamina C, riboflavina e vitamina B<sub>12</sub>.

Antibiotici: penicillina, tetracicline.

Produzione di biomasse.

Biotrasformazioni di steroidi e di altri substrati.

#### Testi:

Rainbow, Rose, "Biochemistry of industrial microorganism", Academic Press.  
Casida, "Industrial microbiology", Wiley.

### 4) Biotecnologie

Principi base di ingegneria genetica. Cellule ed enzimi immobilizzati.  
Ricerca di nuovi antibiotici.

#### Testi:

Peppler, Perlman, "Microbial technology", Academic Press.  
Prentis, "Biotechnology Orbis", (Londra).  
Cruegher, "Biotechnology", Science Tech. Inc.  
Wiseman, "Principles of Biotechnology", Surrey Univ. Press.

### 5) Tecnologia delle fermentazioni

Isoamento e conservazione delle specie microbiche.  
Fermentazioni in laboratorio, in impianto pilota ed industriale.  
Fermentatori dispositivi di regolazione, aereazione ed agitazione.  
Fermentazioni in continuo.  
Monitoraggio e controllo di fermentazioni.  
Separazione e purificazione dei prodotti ottenuti.

#### Testi:

Simon, "Microbiologie industrielle et genie biochimique", Masson.  
Wiseman, "Principles of biotechnology", Surrey University Press.  
Il corso comprende anche esercitazioni sugli argomenti trattati.

## 36. CHIMICA MACROMOLECOLARE

PROF. MARIO FARINA

### Programma del corso

#### 1) Introduzione

Nozioni fondamentali. Criteri in chimica macromolecolare. Polimeri lineari, ramificati, reticolati. Omopolimeri e copolimeri. Peso molecolare e grado di polimerizzazione. Diversi tipi di medie nella determinazione dei pesi molecolari. Indice di polidispersità. Nozioni preliminari sulla sintesi di macromolecole. Policondensazione. Poliaddizione di monomeri vinilici e dienici. Polimerizzazione con apertura di anello e con isomerizzazione.

#### 2) Struttura dei polimeri

Richiami di stereochemica. Analisi configurazionale di composti a catena con due o più atomi asimmetrici. Analisi conformazionale di molecole lineari e ra-

mificate con più di cinque atomi di carbonio. Trattazione quantitativa dell'analisi conformazionale (metodo di Wesheimer).

Stereochimica macromolecolare. Problemi conformazionali: disposizione a zig-zag, ad elica e a gomito. Problemi configurazionali: polimeri isotattici, sindiotattici, atattici e  $z$  stereoblocchi, *cis* e *trans* tattici. Cristallinità di polimeri. Uso di metodi spettroscopici nello studio delle strutture macromolecolari. Microtatticità.

### 3) *Proprietà in soluzione e misura del peso molecolare*

Aspetti fenomenologici della dissoluzione dei polimeri. Parametri di solubilità. Cenni sulla termodinamica delle soluzioni macromolecolari. Teoria di Flory-Huggins, temperatura  $\Theta$ . Osmometria e altri metodi colligativi per la misura del peso molecolare medio numerale.

Determinazione del peso molecolare medio ponderale mediante diffusione della luce; caso della particella puntiforme e della particella estesa, diagramma di Zimm. Cenni sull'ultracentrifugazione.

Viscosimetria: aspetti sperimentali e teorici. Teoria di Flory-Fox. Dimensioni non perturbate: relazione fra proprietà idrodinamiche e conformazionali delle macromolecole. Calcolo del rapporto caratteristico. Frazionamento di polimeri. Tecniche GPC e HPLC.

### 4) *Proprietà di massa dei polimeri*

Morfologia di polimeri cristallini, orientamento dei cristalliti sotto tiro. Temperatura di fusione ( $t_f$ ), storia termica dei polimeri. Stato vetroso, temperatura di transizione vetrosa ( $t_g$ ). Dipendenza di  $t_f$  e  $t_g$  dalla struttura dei polimeri, modifica di dette temperature.

Proprietà meccaniche dei polimeri. Curve sforzo-allungamento di polimeri amorfi (sopra e sotto  $t_g$ ) di polimeri cristallini. Cenni sul comportamento elastico delle gomme. Viscoelasticità rilassamento e scorrimento. Modifica delle proprietà meccaniche uso di cariche, materiali composti.

### 5) *Sintesi e reazioni di macromolecole*

Policondensazione: principali tipi di monomeri e di reazioni. Cinetica di policondensazione. Distribuzione e regolazione dei pesi molecolari. Policondensati lineari e reticolati e loro importanza industriale. Punto di gel. Considerazioni termodinamiche sulle poliaddizioni.

Polimerizzazioni radicaliche: studio cinetico, regolazione del peso molecolare. Aspetti tecnici della polimerizzazione radicalica, processo in massa, in sospensione, in soluzione e in emulsione. Polimeri di importanza industriale.

Polimerizzazione anioniche e cationiche. Polimeri viventi, copolimeri a blocchi. Polimerizzazioni ioniche stereospecifiche.

Polimerizzazione Ziegler-Natta. Meccanismo di stereospecificità, catalizzatori eterogenei ed omogenei. Prodotti di interesse industriale: polietilene ad alta densità, polipropilene, copolimeri, terpolimeri, polibutadiene, polisoprene e polipentenamero.

Coopolimerizzazione, rapporti di reattività, diagrammi  $F_1-f_1$ . Distribuzione delle sequenze di unità monomeriche. Previsione dei rapporti di reattività. Schema Q-e.

Reazioni dei polimeri. Degradazione. Stabilizzazione.

### 6) *Tecnologia dei materiali polimerici*

Impiego dei materiali polimerici e tecnologia della loro lavorazione. Fibre. Gomme. Vulcanizzazione. Importanza industriale dei materiali polimerici. Problemi di approvvigionamento e di produzione delle materie prime, degli intermedi e degli additivi.

### 7) *Biopolimeri*

Aspetti macromolecolari delle sostanze naturali. Prodotti idrocarburici (gomma naturale). Polisaccaridi (amido e cellulosa). Proteine. Acidi nucleici. Struttura primaria, secondaria e terziaria.

*Testo consigliato:*

J.M.G. Cowie, *Polymers, Chemistry and Physics of modern material*, Intext books, Aylesbury, U.K.

## 37. SPETTROSCOPIA MOLECOLARE

PROF.

1. La radiazione elettromagnetica e la sua interazione con la materia. Radiazione elettromagnetica: trattazione classica e quantistica. Assorbimento ed emissione di radiazione. Ampiezza della linea, effetti che portano al suo allargamento e loro rimozione.
2. Spettroscopia rotazionale. Modelli di rotatore. Spettroscopia Raman rotazionale. Determinazione della struttura molecolare a partire dalle costanti rotazionali.
3. Spettroscopia vibrazionale. Potenziale armonico e coordinate normali. Anarmonicità. Spettri infrarossi e Raman.
4. Spettroscopia elettronica. Spettri atomici e classificazione degli stati atomici. Spettri di molecole biatomiche e loro stati elettronici. Struttura vibrazionale e rotazionale. Spettri di molecole poliatomiche e loro stati elettronici. Cromofori. Struttura vibrazionale e rotazionale.
5. Spettroscopia fotoelettronica ed Auger. Processi di ionizzazione e teorema di Kopmans. Spettroscopia ESCA. Spettroscopia Auger. EXAFS.

6. Lasers e spettroscopia laser.  
Discussione generale dei laser ed esempi di lasers.  
Uso dei lasers in spettroscopia: Raman stimolato, CARS, spettroscopie a molti fotoni, spettroscopia di molecole in fasci.

*Testo consigliato*

Modern Spectroscopy – Michael Hollas, John Wiley & Sons.

### 38. COMPLEMENTI DI CHIMICA ORGANICA

PROF. STEFANO MAIORANA

Si prendono in esame classi di prodotti biologicamente attivi di grande importanza pratica e commerciale: per ciascuna classe vengono date notizie sul meccanismo di azione, sui metodi di valutazione dell'attività biologica in vitro ed in vivo con notizie riguardanti le correlazioni struttura-attività.

Vengono descritte le più comuni vie di accesso (fermentazione, sintesi) facendo emergere le problematiche connesse.

Particolare rilievo viene dato ai criteri che indirizzano, a livello industriale, le scelte riguardanti la ricerca e sviluppo di nuovi prodotti oltre ad illustrare l'iter di sviluppo di un nuovo farmaco compresi i problemi brevettuali (illustrati da un esperto del campo).

Si tengono inoltre alcune lezioni sulla ricerca bibliografica manuale e on-line. Durante il corso potranno anche tenersi esercitazioni di vario tipo (ricerca bibliografica, progettazione di sintesi di prodotti industriali ecc.).

- 1) *Anti-infiammatori non-steroidi*  
Derivati dall'acido benzoico  
Derivati degli acidi arilacetici  
Derivati degli acidi  $\alpha$ -arilpropionici  
Derivati oxicam
- 2) *Derivati con attività antibatterica*
  - A) Antibiotici  $\beta$ -lattamici:  
Penicilline e Penicilline semisintetiche  
Cefalosporine e Cefalosporine semisintetiche  
Penem e derivati  
Tienamicina  
Nocardicine  
Monobattami
  - B) Antibiotici di strutture varie (cenni)  
Macrolidi  
Aminoglicosidi  
Tetracicline

Licomicine  
Poliipeptidi  
Altri

- C) Nuovi antibatterici di sintesi: derivati chinolonici  
Chinoloni di I generazione  
Chinoloni di II generazione

#### 3) *Legislazione brevettuale*

Viene definita la proprietà industriale, l'oggetto del brevetto, la prassi brevettuale con cenni alla legislazione brevettuale in Italia e nel mondo e con particolare riferimento alle classi di farmaci prese in esame. Tappe dello sviluppo di un nuovo farmaco.

#### 4) *Composti ad attività insetticida*

Caratteristiche generali, classificazione, cenni su meccanismi d'azione.

Vengono esaminati in particolare i fenomeni in relazione al loro utilizzo ed ai metodi di sintesi.

#### 5) *Ricerca bibliografica manuale*

Vantaggi e svantaggi della ricerca on-line, vie di accesso ai Database. Comandi fondamentali per l'interrogazione del C.A.

Agli studenti viene fornito materiale didattico sotto forma di fotocopie dei lucidi discussi a lezione.

### 39. CHIMICA DEI COMPOSTI ELEMENTORGANICI

PROF. ALESSANDRO PASINI

Programma svolto nell'anno accademico 1989/90

- 1) Generalità sul legame elemento-carbonio. Stabilità termodinamica e vie di decomposizione. Metodi generali di formazione.
- 2) Gruppo 1. Eteri corona. Litio alchili, preparazioni e proprietà. Interazioni con idrocarburi aromatici.
- 3) Gruppo 2. Grignard e magnesio alchili.
- 4) Alluminio alchili, preparazioni e proprietà. Oligomerizzazione dell'etilene.
- 5) Legami policentrici bieletronici.
- 6) Composti mercurio organici. Reazioni con doppi legami e areni.
- 7) Metalli di transizione. Cenni di teoria del campo cristallino, proprietà magnetiche e spettroscopiche, orbitali molecolari nei composti di coordinazione, complessi con legami sigma e pi greco.
- 8) Aspetti termodinamici e cinetici dei composti di coordinazione. Costanti di stabilità. Meccanismi di sostituzione dei leganti, effetto trans e trans influenza, reazioni di trasferimento di elettroni.

- 9) Numeri di ossidazione e di coordinazione. Regola dei 18 elettroni e sue eccezioni, stabilizzazione degli stati di ossidazione.
- 10) Metallo carbonili, strutture, preparazioni e reattività. Reazione di shift del gas d'acqua. Reagente di Collman.
- 11) Metallo icruri. Preparazione e reattività, caratteristiche icruriche e acide. Complessi di diidrogeno.
- 12) Leganti anionici e isomerie di legante.
- 13) Complessi di diazoto e il problema della sua riduzione.
- 14) Metallo nitrosili lineari e piegati.
- 15) Complessi delle fosfine. Aspetti elettronici e sterici, angolo conico.
- 16) Complessi delle olefine, aspetti strutturali, reattività. Complessi con dieni.
- 17) Metallo ciclopentadienili. Complessi a sandwich, "bent" e monociclopentadienili. Reattività del ciclopentadienile coordinato.
- 18) Complessi degli acetileni, strutture e reattività, oligomerizzazione dell'acetilene.
- 19) Complessi pigreco allilici, preparazioni, strutture e reattività. Isomerizzazione di olefine. Bisallilnichel, trimerizzazione del butadiene. Reattività di allilnichelcloruro e allilpalladiocloruro.
- 20) Sigma alchili. Stabilità e modi di decomposizione, preparazioni e reattività.
- 21) Carbeni "tipo Fischer" e "tipo Schrock". Preparazioni, strutture, proprietà e reattività. Carbini. Reagente di Tebbe.
- 22) Complessi di diossigeno. Superossidi, perossidi e ossocomposti.
- 23) Processi flussionali e loro studio.
- 24) Somme ossidative. Generalità. Somme ossidative bieletroniche di: protoni, alogenuri alchilici, diidrogeno (rottura omolitica ed eterolitica), silani (idrosililazione), legame C-H intra- e intermolecolare (sistemi agostici, attivazione di idrocarburi, deidrogenazione di alcani), legame C-C. Somme ossidative mono-elettroniche. Cianocobaltati. Sistemi bimetallici.
- 25) Eliminazioni riduttive intramolecolari. Influenza dei fattori elettronici e geometrici.
- 26) Reazioni di inserzione-migrazione. Alchili su CO, idruri su olefine, isomerizzazione di olefine, alchili su olefine, polimerizzazione di olefine.
- 27) Attacchi nucleofili intermolecolari ai leganti: CO, olefine, acetileni, sistemi pigreco delocalizzati (regole di Davies, Green e-Mingos), carbeni.
- 28) Catalisi omogenea, aspetti cinetici e termodinamici, cicli catalitici.
- 29) Idrogenazione catalitica omogenea. Meccanismo idrurico (catalizzatore di Wilkinson-Coffey), meccanismo olefinico, idrogenazione asimmetrica (meccanismo di Halpern), sistemi monoidrurici, altri sistemi. Attivazione omolitica, cianocobaltato. Attivazione eterolitica. Idrosililazione. Idrocianazione del butadiene.
- 30) Carbonilazione del metanolo. Processi BASF e Monsanto, altri sistemi. Anidride acetica (Eastman). Ossalati. Glicol etilenico.
- 31) Processo Wacker.
- 32) Idroformilazione. Cobalto carbonile, "cobalto modificato", rodio. CO e acqua come fonte di idrogeno. Carbossialchilazioni.
- 33) Metatesi di olefine. Processo SHOP.
- 34) Polimerizzazione di etilene e propilene, possibili meccanismi.

#### CORSO INTEGRATIVO SU "CHIMICA ORGANOMETALLICA DI SUPERFICIE. UN APPROCCIO MOLECOLARE ALLA CATALISI DI SUPERFICIE".

Dott. Rinaldo Psaro

Programma svolto

- 1) Clusters carbonilici e chimica organometallica. Legami C-H, C-C, C-O.
- 2) Catalisi omogenea via clusters carbonilici.
- 3) Chimica organometallica di superficie. Natura della superficie degli ossidi. Approccio molecolare alle reazioni di superficie.

#### 40. CRISTALLOCHIMICA

PROF. MICHELE CATTI

Il corso di Cristallografia fornisce le conoscenze chimiche e fisiche di base sui solidi cristallini ideali (non difettivi), con particolare accento rivolto al ruolo delle proprietà strutturali. Nella prima parte del corso si esaminano il comportamento statico e dinamico degli atomi e gli stati stazionari degli elettroni nel reticolo cristallino periodico, alla luce del concetto di zona di Brillouin. Nella seconda parte viene considerata la configurazione strutturale atomica dei principali tipi di solidi (ionici, covalenti e molecolari), ricercando i fattori da cui essa dipende e ricorrendo a diversi esempi specifici; inoltre uno spazio apposito è dedicato allo studio delle trasformazioni tra fasi cristalline e struttura diversa, nei suoi aspetti sia atomistici sia termodinamici.

*L'energia di coesione di atomi e molecole nello stato cristallino*

- energia statica: modellato semiempirico di Born-mayer; metodo di Ewald per il calcolo delle interazioni elettrostatiche tra ioni;
- energia vibrazionale: dinamica reticolare nell'approssimazione armonica; relazioni di dispersione, modi normali di vibrazione, fononi acustici e ottici; legame con le proprietà termodinamiche.

*Il legame chimico nei solidi*

- effetto della periodicità cristallina su livelli e funzione d'onda elettronica: teorema di Bloch, bande di energia, modello di Kronig-Penney dell'elettrone in una buca di potenziale periodica;
- proprietà elettroniche e ottiche di isolanti e semiconduttori, ionicità e covalenza nei solidi: teoria di Philips-Van Vechten.

*Fattori che influenzano la struttura dei solidi cristallini*

- effetti sterici, impacchettamenti compatti, principali tipi strutturali dei solidi inorganici più semplici, relazioni tra struttura e proprietà chimico-fisiche;



- tipo di legame chimico: direzionalità del legame covalente; effetti elettronici; ibridizzazione degli orbitali e stato semimetallico; configurazione degli elettroni d; distorsione Jahn-Teller;
- cristalli molecolari: forze dispersive; teoria di Kitaigorodskii dell'impacchettamento delle molecole nello stato solido; ruolo strutturale del legame idrogeno.

#### *Trasformazioni strutturali allo stato solido*

- classificazione termodinamica e strutturale delle transizioni di fase;
- parametro d'ordine e teoria di Landau delle trasformazioni di fase;
- proprietà di interesse applicativo collegate ai cambiamenti strutturali ferroici (ferroelettricità, ferroelasticità, ferromagnetismo).

## 41. COMPLEMENTI DI CHIMICA FISICA

PROF. EMANUELE ORTOLEVA

### *Vettori e sistemi di coordinate*

Sistemi di coordinate cartesiane e curvilinee, ortogonali, localmente ortogonali e non ortogonali. Trasformazione da un sistema di coordinate all'altro, il determinante jacobiano. Vettori, prodotto scalare e prodotto vettoriale. Integrali di superficie e integrali di volume. Campi vettoriali, gradiente, divergenza, rotore. Teoremi di Gauss e di Stokes. Il Laplaciano in coordinate sferiche.

### *Funzioni di variabile complessa*

Numeri complessi, funzioni di variabile complessa. Radici di un numero complesso, funzioni a valori multipli e superfici di Riemann. Analicità di una funzione complessa, teorema di Cauchy, formula integrale di Cauchy. Serie complesse: serie di Taylor e Laurent. Zeri e singolarità di una funzione. Teoremi dei residui. Lemma di Jordan. Calcolo di Integrali nel campo complesso utilizzati nella parte successiva del corso.

### *Serie di Fourier*

Definizione della serie di Fourier. Proprietà di parità. Serie in seno e coseno. Forma complessa della serie di Fourier. Convergenza puntuale e convergenza in media, disequaglianza di Bessel e equazione di Parseval. Reazione di completezza di un insieme di funzioni. Serie di Fourier generalizzata. Serie di Fourier in tre dimensioni. La terna reciproca.

### *Funzione $\delta$ di Dirac*

Funzioni a cuspidi e funzione  $\delta$  di Dirac. Rappresentazioni della funzione  $\delta$ : successioni  $\delta$  e convergenza debole. Proprietà della  $\delta$ . Sviluppo in serie di Fourier della  $\delta$ . Rappresentazione come integrale.  $\delta$  di Dirac in tre dimensioni.

### *Trasformata di Fourier*

Trasformata e trasformata inversa. Esempi di trasformate di Fourier. Proprietà delle trasformate. Trasformata della  $\delta$  di Dirac. Convoluzione di due funzioni, trasformata del prodotto e della convoluzione. Teorema integrale di Fourier. Equazione di Parseval per le trasformate di Fourier. Il teorema della larghezza di banda. Trasformata di Fourier in tre dimensioni. Risoluzione dell'equazione di un oscillatore armonico mediante le trasformate di Fourier. Trasformata di Fourier di un reticolo di punti di dimensioni finite. Applicazioni delle trasformate di Fourier: diffrazione di un onda, allargamento di una riga in spettroscopia, la densità elettronica in un cristallo e il fattore di struttura, il principio di indeterminazione, la probabilità di transizione di una coppia di particelle.

### *Equazioni differenziali lineari del secondo ordine*

Il Wronskiano. Soluzione generale dell'equazione omogenea. L'equazione non omogenea. Soluzione in serie di potenze dell'equazione omogenea: il metodo di Frobenius.

### *Equazioni differenziali alle derivate parziali*

Il metodo della separazione delle variabili. L'equazione della diffusione. L'equazione di Helmholtz. Equazioni agli autovalori autofunzioni, le autofunzioni come insieme completo. Il problema di Sturm-Liouville.

### *Operatori*

Operatori aggiunti, operatori Hermitiani. Proprietà degli operatori hermitiani. Commutatore di due operatori, proprietà degli operatori commutanti.

### *Funzioni speciali usate in meccanica quantistica*

Soluzione della parte angolare dell'equazione di Schrödinger per un campo centrale. Polinomi di Legendre e armoniche sferiche. Proprietà delle armoniche sferiche.

### *Testi consigliati:*

E. Butkov, *Mathematical Physics*. Addison-Wesley Publishing Co. 1968.  
K.F. Riley, *Mathematical Methods for the Physical Science*. Cambridge University Press 1974.

## 42. CHIMICA INORGANICA SUPERIORE

PROF.SSA FRANCA MORAZZONI

L'insegnamento di chimica inorganica superiore è rivolto agli studenti di chimica e chimica industriale che desiderano approfondire, nel triennio di applicazione, le nozioni di chimica inorganica apprese nel biennio propedeutico. Il corso che, nell'attuale piano di studi, è preceduto dai due insegnamenti di Chimica

Generale e Inorganica, fa ad essi riferimento per quanto concerne la sistematica della chimica inorganica. È utile affiancato dagli insegnamenti di: Chimica dei Composti di Coordinazione, Complementi di Chimica Fisica, Stereochimica Inorganica, Cristallografia, Chimica Quantistica, Chimica Teorica, Spettroscopia Molecolare, Strutturistica Chimica, Chimica Fisica dello Stato Solido. È scopo primo del corso informare gli studenti sull'origine e lo sviluppo degli argomenti alla base della attuale ricerca nel campo delle relazioni tra proprietà e struttura elettronica dei composti inorganici e di coordinazione.

#### Indicazione dei contenuti

I contenuti del corso sono raggruppabili in due temi principali:

- 1) struttura elettronica e natura del legame chimico nei composti di coordinazione dei metalli di transizione, mono e polinucleari.
- 2) Relazioni tra struttura elettronica e proprietà, aspetti modellistici dei composti di coordinazione mono e polinucleari dei metalli di transizione.
- 1) Richiami di meccanica quantistica, fondamenti di teoria dei gruppi. Modelli di calcolo delle energie elettroniche nei complessi dei metalli di transizione: il modello dell'orbitale molecolare (MO), la sovrapposizione angolare (Angular-Overlap), il modello del campo dei leganti. Energie di ioni  $d^n$  in campi di leganti a simmetria variabile. Diagrammi di Tanabe e Sugano. Tecniche spettroscopiche di indagine delle energie elettroniche: richiami di spettroscopia elettronica, interpretazione degli spettri elettronici dei composti dei metalli di transizione in campi di leganti a differente simmetria. Esercizi. Principi di magnetismo: equazione di Van Vleck; misure di suscettività, interazione intermolecolare, equilibrio di spin. Esercizi.
- 2) a) Proprietà elettroniche dei complessi mononucleari dei metalli di transizione nei bassi stati di ossidazione; proprietà elettroniche dei sistemi polinucleari dei metalli di transizione; relazioni tra struttura elettronica, proprietà e attività catalitica.
- b) I complessi dei metalli di transizione come modelli di struttura elettronica di sistemi inorganici complicati (materiali, biomolecole).

#### Testi consigliati:

- F.A. Cotton, G. Wilkinson, *Advanced inorganic Chemistry*; IV Edition.  
 F.A. Cotton, *Chemical Applications of Group Theory*, Interscience Publishers, J. Wiley & Sons (1963).  
 R.S. Drago, *Physical methods in Chemistry*, W.B. Saunders Company (1977).  
 A.B.P. Lever, *Inorganic Electronic Spectroscopy*, Elsevier (1968).  
 F.E. Mabbs, D.J. Machin, *Magnetism and Transition Metal Complexes*, Chapman and Hall (1973).  
 L. Maatosta, S. Cenini, *Zerovalent compounds of metals*, Academic Press (1974).

## 43. ELETTROCHIMICA

PROF. TORQUATO MUSSINI

### Programma

#### Parte I - Generalità e definizioni

Pile e generatori. Elettrolizzatori. Rendimenti di corrente. Fattori che determinano i rendimenti di corrente. Voltometri e coulombometri. Polarizzazione chimica. Polarizzazione di concentrazione.

#### Parte II - Elettroliti

Varie classi di elettroliti. Mobilità ioniche, conducibilità elettrica, numero di trasporto ionico. Trasporto di materia nelle soluzioni elettrolitiche in seguito al passaggio di corrente. Elettroliti solidi. Sali fusi. Soluzioni elettrolitiche. Soluti ionofori e soluti ionogeni. Teoria di Arrhenius. Meccanismi a salto. Moto viscoso. Conducibilità specifica e conducibilità equivalente. Metodi e risultati sperimentali. Mobilità ioniche. Numeri di trasporto. Conducibilità specifica. Variazioni alla conducibilità con la concentrazione. Variazione della conducibilità con la temperatura e la pressione. Interazione soluto-solvente. Interazione con scambio di protoni. Interazioni elettrostatiche ione dipolo. Energie di idratazione degli ioni. Numero di idratazione. Interazione ione ione. Interazione elettrostatiche. Proprietà di trasporto in presenza di interazioni elettrostatiche. Potenziale chimico degli ioni in soluzione. Stato standard per il solvente. Stato standard per il soluto. Coefficienti di attività media. Dipendenza dei coefficienti d'attività ionica media dalla concentrazione. Determinazione non elettrochimica dei coefficienti d'attività ionica media.

#### Parte III - Energia elettrochimica

Equilibri elettrochimici. Convenzioni di segno. Misure di forze elettromotrici non dipendenti dalla concentrazione dell'elettrolita. Energie libere di formazione. Energie libere di reazione. Energie libere di trasporto. Misure di F.E.M. dipendenti dalla composizione della soluzione. Determinazione di F.E.M. standard ( $E^\circ$ ) di pile e di coefficienti d'attività ionica media ( $\gamma^\pm$ ) di elettroliti. Potenziale di diffusione (potenziali interliquido) e loro segnatura. Minimizzazione del potenziale interliquido; pile con "ponte salino". Pile con trasporto. Metodo di F.E.M. per la determinazione dei numeri di trasporto ionico.

#### Parte IV - Semielementi galvanici

Classificazione dei semielementi galvanici. F.E.M. dei semielementi galvanici in condizioni standard. Serie elettrochimica e convenzioni di segno. Coefficienti di temperatura. Convenzioni termodinamiche elettrochimiche per i semielementi galvanici. Entropia degli ioni: scala termodinamica, scala elettrochimica, scala assoluta. Alcune considerazioni sulla serie elettrochimica dei potenziali standard ( $E^\circ$ ). Potenziale dei semielementi galvanici: dipendenza dalla concentrazione. Misura del potenziale di un semielemento galvanico. Determinazione dei coefficienti di temperatura "assoluti" dei potenziali standard. Determinazione

di potenziale standar dei semielementi galvanici implicanti incompatibilità di varia natura. Membrane e fenomeni elettrochimici di membrana. Rappresentazione grafica dell'equilibrio elettrochimico dei semielementi galvanici. Diagrammi potenziale/pH (Diagrammi di Pourbaix).

#### *Parte V - Doppio strato elettrico*

Equilibri eterogenei in presenza di speci cariche mobili. Struttura dell'interfase, e doppio strato elettrico. Stato standard degli elettroni, e lavoro di trasporto degli elettroni in un metallo. Potenziale elettrochimico e lavoro di estrazione elettrolitica. Equilibrio metallo-metallo. Potenziale di contatto. Equilibrio soluzione-soluzione. Potenziale elettrochimico degli ioni. Equilibrio metallo-soluzione. Valutazione dei potenziali assoluti. Equilibrio in una catena galvanica regolarmente aperta. Termodinamica dell'interfase. Elettrodi polarizzabili e non polarizzabili. L'equazione elettrocapillare. Metodi sperimentali per lo studio dell'interfase. Misura della tensione interfacciale. Misura della capacità differenziale. Struttura del doppio strato. Modello del doppio strato all'interfase elettrodo/soluzione elettrolitica. Moto relativo delle due fasi. Fenomeni elettrocinetici.

#### *Parte VI - Cinetica elettrochimica*

Dissipazione all'interfase. Sovratensione di trasporto materiale. Sovratensione di trasporto di carica. Sovratensione di barriera. Sovratensione di reazione. Misura della sovratensione e bilancio di tensione di un sistema elettrochimico. Controllo cinetico misto. Processi catodici; sovratensione d'idrogeno. Processi anodici. Reazioni successive e concorrenti. Elementi galvanici in corto circuito, e potenziali misti: diagrammi di Evans. Passività e transpassività.

#### *Testo*

G. Bianchi, T. Mussini, *Elettrochimica*, Tamburini-Masson, 1976, Milano.

## 44. CHIMICA QUANTISTICA

PROF. ERMANNO GIANINETTI

#### *Richiami di meccanica analitica*

Leggi di moto nel formalismo Newtoniano. Principio della minima azione e formalismo Lagrangiano. Concetto generale di trasformazione di Legendre (ricordiamo anche le applicazioni in termodinamica: potenziali termodinamici). Formalismo Hamiltoniano. Simmetrie e costanti di moto. Parentesi di Poisson. Oscillatore armonico. Particella materiale in campo centrale e momento angolare. Sistema di particelle materiali mutuamente integranti. Spazio delle fasi e meccanica statistica. Equazione di Liouville. Primo e secondo teorema di Liouville. Le costanti di moto in meccanica statistica.

#### *Elementi di meccanica quantistica*

Spazi vettoriali in generale. Notazione di Dirac. Tipi di operatori: normali, hermitiani, unitari, proiettori. Autovalori ed autovettori di un operatore hermitiano. Spettro discreto e spettro continuo. Operatori commutanti. Trasformazione di Fourier e funzione "delta" di Dirac. Operatore hamiltoniano ed equazione di Schrödinger dipendente dal tempo. Interpretazione fisica della funzione d'onda.

Particella libera sulla linea. Principio di Heisenberg. Urto contro la barriera. Buca di potenziale e stati legati, equazione di Schrödinger non dipendente dal tempo. Buca infinita di potenziale. Urto contro una buca. Oscillatore armonico.

Oscillatore armonico tridimensionale e particella nella scatola. Simmetria e degenerazione.

Osservabili compatibili e costanti di moto in meccanica quantistica. Teorema di Ehrenfest e principio di corrispondenza. Postulati generali della meccanica quantistica. Il problema dell'oscillatore armonico svolto con gli operatori di spostamento.

#### *Particella in campo centrale*

Coordinate sferiche. Operatore hamiltoniano in coordinate sferiche. Momento angolare orbitale. Separazione delle variabili per l'equazione di Schrödinger. Struttura generale degli autovettori e degli autovalori per operatori di momento angolare. Autovalori ed autofunzioni nel caso degli operatori di momento angolare orbitale facendo ampio uso degli operatori di spostamento. Atomo di idrogeno. Rotatore rigido.

#### *Metodi approssimati*

Principio variazione e metodi variazionali. Variazioni lineari ed equazione secondaria. Teorema di separazione per gli autovalori approssimati. Trattazione approssimata per l'oscillatore armonico, per la buca di potenziale infinita e per l'atomo di idrogeno.

Teoria delle perturbazioni fino al secondo ordine. Perturbazioni in presenza di degenerazione. Oscillatore armonico. Effetto Stark-Lo Surdo per l'atomo di idrogeno.

#### *Spin ed antisimmetria*

Esperienza di Stern e Gerlach. Operatori di spin e loro autofunzioni per  $N$  elettroni. Sistemi di più elettroni ed antisimmetria. Funzioni di spin e loro generazione con il metodo genealogico. Diagramma di diramazione. Modelli elementari di funzioni d'onda polielettroniche. Determinante di Slater. Valori medi di osservabili per il determinante di Slater.

#### *Struttura atomica*

Orbitali atomici ed orbitali di Slater. Metodo di Hartree-Fock ed approssimazione del campo centrale. Struttura dei multipletti. Interazione spin-orbita e struttura fine. Sistema periodico degli elementi. Esempi di calcoli approssimati per atomi con pochi elettroni.

### *Emissione ed assorbimento della radiazione elettromagnetica*

Richiami di elettromagnetismo. Potenziali elettromagnetici. Spettro del corpo nero. Funzione hamiltoniana ed equazione di Schrödinger per una particella carica in campo elettromagnetico. Perturbazioni dipendenti dal tempo. Coefficienti di assorbimento e di emissione indotta e spontanea. Regole di selezione per l'oscillatore armonico e per l'elettrone in campo centrale. Effetto Zeeman. effetto Zeeman anomalo. Effetto Paschen-Back. L'effetto fotoelettrico. Il principio del laser.

### *Struttura elettronica delle molecole*

Separazione del moto nucleare da quello elettronico (approssimazione di Born-Oppenheimer). Modelli ad orbitali molecolari ortonormali. Metodi di minimizzazione dell'energia. Interazione di configurazioni. Modelli ad orbitali molecolari non ortogonali. La molecola di idrogeno (i lavori di Heiter-London, Wang, Coulson-Fischer). Strutture e "risonanza" fra strutture. Le molecole biatomiche e poliatomiche. Formazione e rottura del legame chimico. Il teorema del viriale. Il teorema di Hellmann-Feynman. Effetti elettrici e magnetici, termini relativistici dell'operatore hamiltoniano. Cenni sulle proprietà fisiche molecolari e sui principi delle più importanti tecniche di spettroscopia molecolare.

## **45. CINETICA CHIMICA**

PROF. PAOLO CARNITI

### *Introduzione*

Richiami dei concetti fondamentali di cinetica chimica svolti in altri corsi.

### *Teorie cinetiche*

Teoria delle collisioni. Teoria dello stato di transizione.

### *Catalisi*

Catalisi omogenea. Meccanismi catalitici. Catalisi acido-basica generale e specifica. Relazione di Brønsted.

### *Catalisi enzimatica*

Meccanismo di Michealis-Menten. Reazioni con due intermedi e reazioni reversibili. Inibizione da substrato. Meccanismi di inibizione. Reazioni con due substrati. Effetto del pH. Effetto della temperatura.

### *Modelli matematici in cinetica chimica*

Impostazione del modello. Metodi di integrazione numerica. Metodi di ottimizzazione. Significatività dei parametri ottimizzanti. Discriminazione tra modelli possibili.

### *Testi di consultazione:*

J.W. Moore, R.G. Pearson, *Kinetic and Mechanism*, J. Wiley, New York, 1981.  
K.J. Laidler, P.S. Bunting, *The Chemical Kinetics of Enzyme Action*, Oxford University Press, Oxford, 1973.  
D.V. Roberts, *Enzyme Kinetics*, Cambridge University Press, Cambridge, 1977.

## **46. SCIENZA DEI METALLI**

PROF. SERGIO TRASATTI

### *Introduzione*

Tipi di solidi. Curve dell'energia. Solidi ionici. Solidi molecolari. Forze di dispersione. Solidi covalenti e metallici.

### *Concetti di meccanica quantistica*

Esperienze fondamentali. Natura dualistica della materia. Heisenberg. Schrödinger. Funzione d'onda. Metodo LCAO. Molecola idrogeno.

### *Teoria dell'elettrone libero*

Modello di Sommerfeld. Quantizzazione. Livello Fermi. Densità degli stati. Lavoro di estrazione elettrolitica. Potenziali di elettroni in una fase. La superficie. Effetto orientazione cristallografica. Potenziale di contatto. Statistica di Fermi-Dirac. Calore specifico elettronico.

### *Teoria delle bande*

Zone di Brillouin. Sovrapposizione. Densità degli stati. Teoria del legame di valenza. Massa effettiva dell'elettrone.

### *Conducibilità elettrica*

Interazione elettrone-fotone. Numero effettivo elettroni liberi. Classi di conduttori. Semiconduttori estrinseci ed intrinseci. Buche elettroniche. Calcolo portatori di carica. Effetto T su livello Fermi. Contatto semiconduttore-metallo. Curvatura delle bande. Stati superficiali. Polarizzazione. Effetto rettificante.

### *Cristalli ionici*

Struttura elettronica. Difetti. Centri di colore. Stechiometrici e non stechiometrici. Descrizione con la teoria delle bande.

### *Magnetismo*

Classi di sostanze magnetiche. Energia di scambio e di promozione elettronica. Interpretazione. Teoria dei domini. Teorie empiriche.

### *Diffusione*

Entropia di mescolamento. Termodinamica di formazione di vacanze. Meccanismi di diffusione. Equazioni di Fick. Effetto Kirkendall. Equazioni di Darken. Autodiffusione. Trattazione teorica coefficienti di diffusione.

### *Proprietà termiche*

Calore specifico reticolare. Calore specifico elettronico. Conducibilità termica. Meccanismi. Dipendenza della conducibilità termica della T.

### *Leghe*

Definizioni. Tipi di leghe. Descrizione generale. Teoria elettronica. Termodinamica. Energia libera e composizione. Diagrammi di stato. Relazioni con i diagrammi di energia libera. Diagrammi a miscibilità totale, con eutettico e peritettico. Variazioni della solubilità allo stato solido con la T.

### *Testi consigliati per la consultazione:*

A.J. Dekker, *Solid State Physics*, MacMillan.

C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, Wiley.

R.E. Reed-Hill, *Physical Metallurgy Principles*, Van Nostrand.

A.H. Cottrell, *Scienza dei Metalli*, Trad. Spineci, Paron, Bologna.

## **47. CHIMICA FISICA DELLE INTERFASI**

PROF.SSA SILVIA ARDIZZONE

### *Termodinamica di sistemi contenenti una interfase*

Descrizione convezionale della regione interfase e grandezze termodinamiche relative. Adsorbimento. Equazione di adsorbimento di Gibbs. Isotherme di adsorbimento ed equazioni di stato bidimensionali di monostrati localizzati e non-localizzati con diverso grado di idealità.

### *Interfasi Elettrificate*

Meccanismi di separazione di carica in superfici diverse. Potenziali di superficie. Componenti della differenza di potenziale interfase. Struttura delle interfasi elettrificate: modello di Gouy-Chapman, modelli di Stern-Grahame. Modelli molecolari.

### *Interfase Fluida (Liquido/Gas e Liquido/Liquido)*

Caratteristiche singolari delle superfici dei liquidi; pressione di Laplace; equazione di Kelvin. Metodi di misura della tensione superficiale. Spandimento ed adesione. Film di spandimento, Film di Langmuir-Blodgett; Film di adsorbimento. Micelle. Detergenza. Emulsioni. Microemulsioni. Schiume.

### *Interfasi Solido/Gas*

Caratterizzazione di una superficie solida. Spettroscopie in alto vuoto. Tensione superficiale ed energia libera nel caso delle superfici solide. Fisisorbimento: tipi

di isoterme. Equazione BET. Adsorbimento su solidi porosi. Termodinamica dell'adsorbimento di gas su solidi.

### *Interfasi Solido/Liquido*

Tensione superficiale critica e bagnabilità di superfici solide. Angoli di contatto. Tensione di adesione ed energia di coesione. Adsorbimento da soluzione. tipo di isoterme, loro determinazione sperimentale ed interpretazione. Interfasi metallo soluzione. Interfasi reversibili. Interfasi ossido/soluzione: caratteristiche singolari e modelli di elettrificazione specifici.

### *Sistemi Colloidali*

Definizione e classificazione. Stabilità ed instabilità termodinamica dei sistemi colloidali. Preparazione di sistemi ad elevata suddivisione. Stadi elementari del processo di precipitazione di fase solida da soluzione e controllo delle caratteristiche morfologiche finali del particolato. Proprietà ottiche e reologiche di sistemi colloidali. Proprietà elettriche: metodi sperimentali per la determinazione dei parametri relativi alle varie regioni del doppio strato.

### *Stabilità di Sospensioni Liofobe*

Significato di stabilità. Tipi di interazioni tra particelle. Repulsione elettrostatica tra doppi-strati per geometrie diverse dei corpi interagenti. Interazioni attrattive; forze di Vander Waals. Curve energia potenziale-distanza. Teoria DLVO.

### *Testi consigliati*

- R. Aveyard and D.A. Haydon, *An Introduction to the Principles of Surface Chemistry*, Cambridge University Press, 1973.

- R.J. Hunter *Foundations of Colloid Science*, Clarendon Press, Oxford 1987.

- A.W. Adamson, *Physical Chemistry of Surfaces*, Interscience Publishers, New York 1967.

## **48. STEREOCHIMICA INORGANICA**

PROF. ANGELO SIRONI

### *Introduzione*

Cenni sui metodi che permettono di determinare la struttura molecolare. Fattori che influenzano i parametri di legame. Raggi atomici, ionici, covalenti, metallici e di van der Waals

### *Orbitali Molecolari*

Orbitali atomici e molecolari. Il legame chimico e le interazioni tra orbitali. Legami a 2 centri e 2 elettroni. Legami 3 centri e 2 o 4 elettroni. Teoria delle perturbazioni intra ed intermolecolari. Uso della simmetria nella derivazione degli Orbitali Molecolari. Derivazione degli Orbitali Molecolari di una specie utiliz-

zando quelli dei suoi frammenti costitutivi. Orbitali Molecolari delle molecole diatomiche, elettronegatività ed uso della teoria delle perturbazioni. Diagrammi di Walsh. Effetto Jahn-Teller al primo e secondo ordine. Interazioni attraverso lo spazio ed attraverso i legami.

#### *Stereochimica degli elementi s e p*

VSEPR. Derivazione degli Orbitali Molecolari ed uso dei diagrammi di Walsh per razionalizzare la stereochimica delle specie  $AX_2$  ( $D_{2h} \rightarrow C_{2v}$ ),  $AX_3$  ( $D_{3h} \rightarrow C_{3v}$ ) e ( $D_{3h} \rightarrow C_{2v}$ ),  $AX_4$  ( $T_d \rightarrow D_{4h}$ ), ( $D_{4h} \rightarrow C_{2v}$ ) e ( $D_{4h} \rightarrow C_{4v}$ ),  $AX_5$  ( $D_{3h} \rightarrow C_{2v} \rightarrow C_{4v}$ ),  $AX_6$  ( $O_h \rightarrow C_{3v}$ ).

#### *Stereochimica degli elementi d*

Orbitali Molecolari dei complessi  $ML_6$  ottaedrici. Interazioni  $\pi$  nei complessi ottaedrici. La regola dei 18 elettroni e le sue eccezioni. Orbitali Molecolari dei complessi  $ML_4$  tetraedrici e quadrato planari. Orbitali Molecolari dei complessi  $ML_5$  bipiramidali trigonali e quadrato piramidali. Orbitali di valenza dei frammenti molecolari più comuni:  $ML_5$  ( $C_{4v}$ ),  $ML_4$  ( $C_{2v}$ ),  $ML_4$  ( $C_{4v}$ ),  $ML_4$  ( $C_{3v}$ ),  $ML_3$  ( $C_{2v}$ ) e  $ML_2$  ( $C_{2v}$ ). Uso della teoria FMO (Fragment Molecular Orbital) per la costruzione e l'interpretazione dei diagrammi MO dei composti organometallici. Analogia isoglobale.

#### *Testi consigliati*

T.A. Albright, J.K. Burdett, M.-H. Whangbo, *Orbital Interaction in Chemistry*, Wiley (1985).

J.E. Fergusson, *Stereochemistry and bonding in Inorganic Chemistry*, Prentice Hall (1974).

## 49. CHIMICA TEORICA

PROF. GABRIELE MOROSI

Obiettivi della chimica teorica.

Hamiltoniana classica. Hamiltoniana nel sistema di laboratorio e hamiltoniana interna.

L'approssimazione di Born-Oppenheimer. Le superfici di energia potenziale. Effetto Jahn-Teller. Effetto Renner-Teller. Correzioni diabatiche

Moto nucleare.

Gli stati legati: moti rotazionali e vibrazionali. Potenziali modello.

Gli stati non legati. Cenni di teoria della collisione: trattazione classica, quantistica, semiclassica.

I liquidi. Il metodo Monte Carlo e la Dinamica Molecolare nella simulazione dei liquidi.

Trattazione quantistica del campo elettromagnetico. Seconda quantizzazione. Interazione materia-campo elettromagnetico. Emissione spontanea ed indotta ed assorbimento indotto. Interazione con  $n$  fotoni.

Cenni di meccanica relativistica classica. L'equazione di Klein-Gordon. L'equazione di Dirac. I momenti magnetico e di spin dell'elettrone. Il fattore  $g$ .

L'hamiltoniana elettronica. La molecola-ione idrogeno. Il metodo Monte Carlo quantistico. L'approssimazione orbitale e l'approssimazione LCAO. Metodi di Thomas-Fermi e di Hartree-Fock.

Proprietà delle funzioni Hartree-Fock. Il metodo di Roothaan e il problema delle basi

La correlazione elettronica. Il metodo interazione di configurazione. Configurazioni aventi simmetria spaziale e di spin. Il metodo genealogico.

La matrice densità.

I metodi MC-SCF e UHF. Gli operatori di proiezione.

Il metodo del legame di valenza. Il metodo dell'accoppiamento di spin. Le strutture covalenti. L'approssimazione dell'accoppiamento perfetto. Gli orbitali ibridi. Le strutture ioniche e gli orbitali polarizzati.

Le funzioni di gruppo generalizzate e il problema dell'hamiltoniana efficace. I metodi basati su hamiltoniane modello. Il metodo di Huckel. Collegamento tra i metodi della chimica teorica e i metodi della fisica dello stato solido. La meccanica molecolare.

#### *Testi consigliati:*

R. McWeeny, B.T. Sutcliffe, *Methods of molecular quantum mechanics*.

R.E. Moss, *Advanced molecular quantum mechanics*.

A. Szabo, N.S. Ustlund, *Modern quantum chemistry: Introduction to advanced electronic structure theory*.

## 50. STEREOCHIMICA ORGANICA

PROF. FRANCO COZZI

*Simmetria molecolare* (8 lezioni)

Elementi di simmetria ed operazioni ad essi associate: determinazione del point group;

classificazione delle molecole e delle subunità molecolari in base alle isometrie;

chiralità, prochiralità, chirotopicità;

classi di prochiralità e desimmetrizzazioni.

*Stereogenicità* (7 lezioni).

Relazioni tra chiralità e stereogenicità;

Unità stereogeniche e prostereogeniche;

classificazione degli stereoisomeri;  
descrittori di configurazione: paragone tra le varie nomenclature;  
descrittori di topicità.

#### *Enantiomeri e racemi (7 lezioni)*

Manifestazioni fisiche della chiralità;  
caratteristiche dei racemi;  
racemizzazioni ed epimerizzazioni;  
risoluzioni spontanee e risoluzioni classiche;  
risoluzioni per inclusione e per cromatografia;  
deracemizzazione.

#### *Sintesi stereoselettive (12 lezioni)*

Classificazione delle sintesi stereoselettive con esempi pratici;  
discussione delle definizioni di: sintesi asimmetrica, induzione asimmetrica, stereospecificità, diastereo- ed enantioselezione;  
riconoscimento enantiomerico e relazioni antipodali;  
valutazione della purezza enantiomerica: diluizione isotopica, metodi ottici, metodi cromatografici, metodi spettroscopici;  
determinazione della configurazione assoluta: metodi empirici e non-empirici.

#### *Razionalizzazione delle sintesi stereoselettive (30 lezioni)*

Validità dei modelli di stereoselezione: regola di Cram e sua evoluzione;  
esempi pratici di varie classi di reazioni stereoselettive fondamentali con razionalizzazione del decorso stereochimico;  
sintesi stereoselettive promosse da complessi di metalli di transizione;  
doppia stereoselezione;  
stereocontrollo nelle reazioni di riarrangiamento sigmatropico.

## 51. CHIMICA FISICA DELLO STATO SOLIDO

PROF. SERGIO PIZZINI

### *Parte prima: Termodinamica delle fasi.*

Definizione di fase, potenziali termodinamici per le fasi chiuse ed aperte, equilibrio fra le fasi, diagrammi di fase.

Decomposizione delle fasi (smiscelamento decomposizione spinodale), fluttuazioni di composizione nelle fasi, fasi non stechiometriche.

### *Parte seconda: Difetti nei solidi.*

Solidi ideali e solidi reali. Difetti di equilibrio e di non equilibrio.

Effetto di campi di deformazione elastica, di campi elettrici e magnetici sulla concentrazione dei difetti.

Difetti di punto, configurazione dei difetti di punto, concentrazione dei difetti di punto (caso di equilibrio).

Difetti di linea e di volume (generalità).

Difetti di punto nelle fasi ad un componente. Configurazione dei difetti di punto nel silicio: dipendenza della configurazione dei difetti dalla temperatura (transizione da difetti puntuali a difetti estesi).

Difetti di punto nelle fasi a più componenti. Configurazione dei difetti di punto nei solidi ionici. Influenza della loro presenza sulle proprietà chimiche e fisiche. Difetti estesi nei solidi: dislocazioni, difetti di impaccamento, bordi di grano, precipitati.

*Parte terza:* Proprietà elettriche e di trasporto dei solidi.

Isolanti, conducibilità ionica degli isolanti, relazione conducibilità-struttura. Semiconduttori, proprietà elettroniche dei semiconduttori, effetto del disordine sulla struttura elettronica dei semiconduttori.

Carattere donore e accettore dei difetti di punto e delle impurezze.

Relazioni fra proprietà elettriche e concentrazione dei difetti nelle fasi non stechiometriche.

*Parte quarta:* Solidi amorfi.

Definizione di stato amorfo e vetroso. Preparazione e struttura delle fasi amorfiche. Proprietà elettriche e magnetiche dei solidi amorfi.

### *Lecture suggerite:*

C. Kittel, "Thermal Physics", W.H. Freeman e Co., San Francisco (1980).

J.H. Crawford Jr e L.M. Slifkin, "Point defects in solids", Plenum Press (1972).

O. Madelung, "Introduction to Solid state Theory", Springer Verlag, Berlino (1978).

F.A. Kroeger, "The chemistry of imperfect crystals", Vol. I, II, III, North Holland, Amsterdam (1973).

C.N. Rao, J. Gopalakrishnan, "New Direction in solid state chemistry", Cambridge University Press (1973), Cambridge.

## 52. CHIMICA BIO-ORGANICA

PROF. UMBERTO VALCAVI

### *Introduzione*

Durante il corso verranno trattati i seguenti principali argomenti:

- 1) Introduzione e parte generale riguardante le reazioni enzimatiche, gli enzimi ed i coenzimi.
- 2) Alcune applicazioni delle reazioni enzimatiche.
- 3) Alcuni cenni sull'uso delle tecniche di ingegneria generica = DNA-ricombinante e sulle applicazioni pratiche.

4) Cenni su alcune reazioni biomimetiche.

1) *Introduzione e parte generale*

- Principali reazioni ottenibili con gli enzimi;
- vantaggi e svantaggi pratici nell'uso degli enzimi;
- classificazioni degli enzimi e principali enzimi usati nelle sintesi organiche;
- coenzimi: principali coenzimi usati, loro costo e loro rigenerazione;
- alcuni cenni sulle cinetiche enzimatiche;
- struttura tridimensionale degli enzimi, siti attivi, importanza della presenza di ioni metallici;
- meccanismi di alcune reazioni enzimatiche (idrogenazioni e deidrogenazioni, ossidrilazioni);
- catalisi multiple.

2) *Alcune applicazioni di reazioni enzimatiche*

- Principali usi degli enzimi nelle sintesi organiche;
- enzimi supportati;
- sintesi biologiche di chironi;
- alcuni esempi di applicazioni industriali: produzione della D-p-idrossi-fenilglicina, dell'acido 6-amminopenicillanico, dell'acido 6-metossi-7-amminocefalosporanico, degli acidi mevini (inibitori nella biosintesi del colesterolo), introduzione di doppi legami o di ossidril negli steroidi, degradazione della catena laterale degli steroidi, produzione di prostaglandine e di alcuni amminoacidi.

3) *Alcuni cenni sull'uso delle tecniche di ingegneria genetica-DNA-ricombinante e sulle applicazioni pratiche*

- Metodiche usate;
- applicazioni in alcune produzioni industriali;
- possibilità future.

4) *Cenni su alcune reazioni biomimetiche*

- Ciclizzazioni biometriche di terpeni;
- uso di "Chemzymes".

*Testi consigliati da consultare:*

- P. Manitto, *Biosynthesis of Natural Products*, Ellis Horwood, Chichester, 1981.  
M.L. Bender, R.J. Bergeron, M. Komiyama, *The Biorganic Chemistry of Enzymatic Catalysis*, J. Wiley and Sons Inc., New York, 1984.  
L. Stryer, *Biochimica*, 3ª edizione, Zanichelli, 1989.  
R.K. Murray, D.R. Granner, P.A. Mayes, V.W. Rodwell, *Harper's Biochemistry*, 22<sup>th</sup> ed., Prentice-Hall Int. Inc., 1990.  
*Enzyme Nomenclature 1984*, Int. Union Biochemistry by Academic Press Inc., 1984.  
T.F. Barman, *Enzymes Handbook*, Springer-Verlag, New York.  
T. Scott, M. Eagleson, *Concise Encyclopedia Biochemistry*, 2<sup>nd</sup> Ed., W. De Gruyter Inc. Hawthorne, N.Y., 1988.

**53. ESERCITAZIONI DI ANALISI CHIMICA APPLICATA**  
PROF. FRANCESCO CARIATI

- 1 - Metodi chemiometrici e analisi dei dati.  
Introduzione alla chemiometria: obiettivi, metodi e applicazioni; analisi dei dati.  
Tecniche di analisi dei dati, di "cluster analysis" e di classificazione.  
Esercitazioni al computer ed esempi applicativi.
- 2 - Principi ed applicazioni delle tecniche di analisi e di caratterizzazione di materiali allo stato solido.
- 3 - Principi ed applicazioni delle tecniche spettroscopiche, spettrometriche e termoanalitiche per l'analisi e la caratterizzazione di superfici e di catalizzatori.
- 4 - Principi ed applicazioni delle tecniche di concentrazione, separazione e di analisi spettroscopiche per microinquinanti organici presenti nell'aria, acqua e suolo e per le loro trasformazioni chimiche.

**CONSIGLIO DEL CORSO DI LAUREA IN CHIMICA**

**PRESIDENTE**

Prof. Giorgio Pagani - Dipartimento di chimica organica e industriale  
- Via Golgi, 19.

**SEGRETARIO**

Prof. Demetrio Pitea - Dipartimento chimica fisica ed elettrochimica - Sezione A  
- Via Golgi, 19.

**SEGRETARIA DIDATTICA DEL C.C.L.**

Sig. Orazio Maccarone - Via Venezian, 21  
Orario 11-12/14-15 dal lunedì al venerdì

**Informazioni**

Orario delle lezioni  
Domanda di entrata in tesi  
Varie.

**RAPPRESENTANTI DEGLI STUDENTI NEL C.C.L.**

Sig. Alessandro Caselli  
Sig. Andrea Roberti  
Sig. Fabio Zuccotto

**COMMISSIONE PIANI DI STUDIO E TRASFERIMENTI**

Prof. Aldo Gamba - Dip. Chim. fis. elettrochim. Sez. A  
Prof. Luisa Garanti - Dip. Chim. Org. e Ind.  
Prof. Sergio Cenini - Dip. Chim. Inorg. e Met.



COMMISSIONE PER LA TESI DI LAUREA

Prof. Francesco Sannicolò, Presidente – Dip. chimica organica e industria e  
 Prof. Alessandro Pasini – Dip. chimica inorganica e metallorganica  
 Prof. Mario Raimondi – Dip. chimica fisica ed elettrochimica sez. A  
 Prof. Angelo Sironi – Ist. chimica strutturistica inorganica.  
 Prof. Torquato Mussini – Dip. chimica fisica ed Elettrochimica sez. B

ISCRITTI A CHIMICA PER L'A.A. 1990/91 (\* compreso Como)

Anno di Corso					
I	II	III	IV	V	F.C.
302	227	149	150	118	201
Totali iscritti: 1142					

CORSO DI LAUREA IN CHIMICA  
 ELENCO ALFABETICO DEGLI INSEGNAMENTI

	programma	
	n°	pag.
CALCOLO NUMERICO	7	
CHIMICA ANALITICA	16	
CHIMICA BIOORGANICA	52	
CHIMICA DEI COMPOSTI DI COORDINAZIONE	26	
CHIMICA DEI COMPOSTI ELEMENTORGANICI	39	
CHIMICA DEI COMPOSTI ETEROCICLICI	27	
CHIMICA DELLE FERMENTAZIONI	35	
CHIMICA DELLE SOSTANZE ORGANICHE NATURALI	28	
CHIMICA FISICA (1° corso)	13	
CHIMICA FISICA I	19	
CHIMICA FISICA II	23	
CHIMICA FISICA DELLE INTERFASI	47	
CHIMICA FISICA DELLO STATO SOLIDO	51	
CHIMICA FISICA ORGANICA	31	
CHIMICA GENERALE ED INORGANICA	1	
CHIMICA INORGANICA (1° corso)	12	
CHIMICA INORGANICA SUPERIORE	42	
CHIMICA MACROMOLECOLARE	36	
CHIMICA ORGANICA (1° corso)	6	
CHIMICA ORGANICA II	17	
CHIMICA ORGANICA APPLICATA	29	
CHIMICA ORGANICA SUPERIORE	32	
CHIMICA QUANTISTICA	44	
CHIMICA TEORICA	49	
CINETICA CHIMICA	45	
COMPLEMENTI DI CHIMICA FISICA	41	
COMPLEMENTI DI CHIMICA ORGANICA	38	

CRISTALLOCHIMICA	40
ELETTROCHIMICA	43
ELETTROCHIMICA ORGANICA CON ESERCITAZIONI	33
ESERCITAZIONI DI ANALISI CHIMICA APPLICATA	53
ESERCITAZIONI DI ANALISI CHIMICA QUANTITATIVA	18
ESERCITAZIONI DI CHIMICA FISICA I	20
ESERCITAZIONI DI CHIMICA FISICA II	24-24bis
ESERCITAZIONI DI CHIMICA ORGANICA E DI ANALISI ORGANICA	21
ESERCITAZ. DI TECNICA E SINTESI SPECIALI ORGANICHE	34
FISICA GENERALE (1° corso)	4
FISICA GENERALE (2° corso)	9
ISTITUZIONI DI MATEMATICHE (1° corso)	3
ISTITUZIONI DI MATEMATICHE (2° corso)	5
LABORATORIO DI CHIMICA ANALITICA (1° corso)	5
LABORATORIO DI CHIMICA ANALITICA (2° corso)	15
LABORATORIO DI CHIMICA GENERALE E INORGANICA	2
LABORATORIO DI CHIMICA FISICA (1° corso)	14
LABORATORIO DI CHIMICA ORGANICA (1° corso)	11
LABORATORIO DI FISICA GENERALE	10
LABORATORIO DI PROGRAMMAZIONE E CALCOLO	8
METODI FISICI IN CHIMICA ORGANICA	25
MINERALOGIA CON ESERCITAZIONI PRATICHE	22
SCIENZA DEI METALLI	46
SPETTROSCOPIA MOLECOLARE	37
STEREOCHIMICA INORGANICA	48
STEREOCHIMICA ORGANICA	50
STRUTTURISTICA CHIMICA	30

## CORSO DI LAUREA IN CHIMICA

### ELENCO ALFABETICO DEI DOCENTI E LORO SEDI

(O) = Ordinario, (A) = Associato, (R) = Ricercatore

			programma n°	pag.
ARDIZZONE	Silvia	(A) Dip. di chim. fis. ed elettrochim.	47	
BLASI	Achille	(A) Dip. Scienze della Terra	23	
CARIATI	Francesco	(O) Dip. di chim. inorg e metallorg.	16-56	
CARNITI	Paolo	(A) Dip. di chim. fis. ed elettrochim.	45	
CATTI	Michele	(O) Dip. di chim. fis. ed elettrochim.	40	
CENINI	Sergio	(O) Dip. di chim. inorg. e metallorg.	1	
CERIOTTI	Alessandro	(A) Dip. di chim. inorg. e metallorg.	2	
COZZI	Franco	(A) Dip. di chim. organica e ind.	50	
DANIELI	Bruno	(A) Dip. di chim. organica e ind.	25	
DELBUTTERC	Paola	(A) Dip. di chim. organica e ind.	21	
DESTEFANO	Stefania	(A) Dip. di matematica	3	
DETISI	Flavia	(A) Dip. di matematica	7	
FARINA	Mario	(O) Dip. di chim. org. e ind.	36	
FAZIO	Michelangelo	(A) Dip. di scienze fisiche	4	
FIORI	Giorgio	(A) Dip. di chim. fis. ed elettrochim.	33	
FORMARO	Leonardo	(A) Dip. di chim. fis. ed elettrochim.	24	
GAMBA	Aldo	(O) Dip. di chim. fis. ed elettrochim.	13-19	
GARANTI	Luisa	(O) Dip. di chim. org. e ind.	21	
GENNARI	Cesare	(A) Dip. di chim. org. e ind.	11	
GIANINETTI	Ermanno	(O) Dip. di chim. fis. ed elettrochim.	44-13	
GRASSI	Maria	(R) Dip. di chim. inorg. e metallorg.	18	
IOMMI	Giancarlo	(O) Dip. di chim. organica e ind.	17	
LUNELLI	Massimiliano	(O) Dip. di matematica	8	
MAIORANA	Stefano	(O) Dip. Chim. Org. e Ind.	38	
MANITTO	Paolo	(O) Dip. di chim. organica e ind.	28	
MARI	Claudio	(A) Dip. di chim. fisica ed elettrochim.	20	
MARTINENGO	Secondo	(A) Dip. di chimica inorgan. e met.	26	
MORAZZONI	Franca	(A) Dip. di chim. inorg. e metallorg.	42	
MOROSI	Gabriele	(A) Dip. di chim. fis. ed elettrochim.	49	
MUSSINI	Torquato	(O) Dip. di chim. fis. ed elettrochim.	43	
ORTOLEVA	Emanuele	(A) Dip. di chim. fis. ed elettrochim.	41	
PAGANI	Giorgio	(O) Dip. di chim. org. e ind.	27	

PALMISANO	Giovanni	(A) Dip. di chimica organica e ind.	21
PASINI	Alessandro	(A) Dip. di chim. inorg. e metallorg.	39
PITEA	Demetrio	(O) Dip. di chim. fis. ed elettrochim.	31
PIZZINI	Sergio	(A) Dip. di chim. fis. ed elettrochim.	51
PORTA	Francesca in Alicante	(A) Dip. di chim. inorg. e metallorg.	2
RAIMONDI	Mario	(A) Dip. di chim. fis. ed elettrochim.	23
RANZI	B. Maria in Lebano	(A) Dip. di fisicl. e biochim. gen.	35
REATTO	Luciano	(A) Dip. di fisica	9
RICCA	Giuliana in Severini	(A) Dip. di chimica organica e ind.	11
RUSSO	Giovanni	(O) Dip. di chimica organica e ind.	6
SANNICOLO	Francesco	(O) Dip. di chimica organica ed ind.	32
SANSONI	Mirella	(A) Ist. di strutturalistica	30
SARTORELLI	Ugo	(A) Dip. di chim. inorg. e metallorg.	5
SCATTURIN	Vladimirio	(O) Ist. di strutturalistica	12
SCOLASTICO	Carlo	(O) Dip. di chimica organica e ind.	34
SELLI	Elena	(R) Dip. di chimica fisica ed elettrochim.	14
SIRONI	Angelo	(A) Ist. di strutturalistica	48
TANTARDINI	Gian Franco	(A) Dip. chim. fis. elettrochim.	24
TRASATTI	Sergio	(O) Dip. di chim. fis. ed elettrochim.	46
VALCANT	Umberto	(A) Dip. di chimica organica e ind.	29-52
VERDI		(O) Dip. di matematica	5
ZANDERIGHI	Giovanni Maria	(A) Dip. di chim. inorg. e metallorg.	15
ZECCHI	Getano	(A) Dip. di chim. org. e ind.	21
ZUFFI	Lina	(A) Dip. fisica	10

### INSEGNAMENTO DELLE LINGUE STRANIERE COME SERVIZIO PER TUTTI GLI STUDENTI DI ATENEIO

Per ampliare l'orizzonte culturale e professionale degli studenti di Ateneio, in attuazione delle direttive emanate in merito dal M.P.I. con la circolare del 30 Luglio 1980, avente per oggetto l'insegnamento delle lingue straniere presso tutti i corsi di laurea, si fa presente che gli studenti iscritti possono, previo assenso dei rispettivi Consigli di Facoltà, inserire nel loro piano di studi corsi di lingue straniere attivati presso altre Facoltà dell'Ateneio, diverse dalla Facoltà cui lo studente si è iscritto.

Tale assenso non è richiesto se le lingue sono inserite in sovrannumero senza sostituire altre discipline.

Accanto a corsi e dottorati di lingue tradizionalmente diffuse come l'inglese, il francese, il tedesco, lo spagnolo e il russo, per gli studenti iscritti a questo Ateneio è possibile seguire corsi di cinese e giapponese (presso la Facoltà di Scienze Politiche) e portoghese e arabo (presso la Facoltà di Lettere e Filosofia).

I corsi di lingua cinese e giapponese sono impostati in modo da consentire l'apprendimento soprattutto della lingua scritta per la lettura della saggistica specializzata relativa a qualsiasi corso di laurea dell'Università e del Politecnico.

Per gli studenti maggiormente meritevoli, al termine di un ciclo triennale, sono previste delle borse di viaggio o di soggiorno in Cina o in Giappone per il perfezionamento delle lingue studiate.

**CORSO DI LAUREA IN CHIMICA INDUSTRIALE**

**1° e 2° anno (NUOVO ORDINAMENTO)**

**3°, 4° e 5° anno (VECCHIO ORDINAMENTO)**

**PIANI DI STUDIO DEL CORSO DI LAUREA  
IN CHIMICA INDUSTRIALE  
(NUOVO ORDINAMENTO)**

**Note illustrative**

La durata del corso degli studi per il conseguimento della Laurea in Chimica Industriale è di cinque anni, divisi in un *triennio propedeutico* e in un *biennio di studi di applicazione*.

Per quanto riguarda l'esenzione dalle tasse ed ogni altra provvidenza a favore degli studenti meritevoli, si stabilisce il piano di studio quantitativo seguente:

- non meno di 4 esami al termine del 1° anno
- non meno di 9 esami al termine del 2° anno
- non meno di 15 esami al termine del 3° anno
- non meno di 20 esami al termine del 4° anno

Per il conseguimento della Laurea in Chimica Industriale lo studente deve superare almeno 24 esami corrispondenti a insegnamenti teorici e di laboratorio impartiti nella Università degli Studi di Milano, tenendo conto delle norme qui di seguito riportate. Lo studente deve, inoltre, superare un colloquio di lingua inglese. La didattica è organizzata, per ciascun anno, in due cicli indicati come Semestri.

**ORGANIZZAZIONE DEGLI STUDI SECONDO LO STATUTO**

(Insegnamenti previsti dal Piano Didattico per il Corso di Laurea di Nuove Ordinamento)

\*\* La numerazione tra < > si riferisce agli esami da sostenere (17 nel Triennio e 7 nel Biennio)

**Triennio di studi propedeutici**

**PRIMO ANNO**

1° Semestre		
Insegnamento		Esami
ISTITUZIONI DI MATEMATICHE 1° corso		<1>
CHIMICA GENERALE ED INORGANICA		<2>
LABORATORIO DI CHIMICA GENERALE ED INORGANICA		<2>
2° Semestre		
CHIMICA ANALITICA		<3>
LABORATORIO DI CHIMICA ANALITICA		<3>
FISICA GENERALE 1° corso		<4>

ISTITUZIONI DI MATEMATICHE 2° corso <5>

**SECONDO ANNO**

1° Semestre		
Insegnamento		Esami
FISICA GENERALE 2° corso		<6>
LABORATORIO DI FISICA GENERALE		<6>
CALCOLI NUMERICI E PROGRAMMAZIONE		<7>
CHIMICA ORGANICA 1° corso		<8>
LABORATORIO DI CHIMICA ORGANICA 1° corso		<8>
2° Semestre		
CHIMICA FISICA 1° corso		<9>
CHIMICA ANALITICA STRUMENTALE		<10>
LABORATORIO DI CHIMICA ANALITICA STRUMENTALE		<10>
CHIMICA BIOLOGICA		<10>

**TERZO ANNO**

1° Semestre		
Insegnamento		Esami
CHIMICA FISICA 2° corso		<12>
LABORATORIO DI CHIMICA FISICA		<12>
CHIMICA ORGANICA 2° corso		<13>
LABORATORIO DI CHIMICA ORGANICA 2° corso		<13>
CHIMICA FISICA INDUSTRIALE		<14>
2° Semestre		
CHIMICA INDUSTRIALE 1° corso		<15>
LABORATORIO DI CHIMICA INDUSTRIALE 1° corso		<15>
PROCESSI E IMPIANTI INDUSTRIALI CHIMICI 1° corso		<16>
LABORATORIO DI PROCESSI E IMPIANTI INDUSTRIALI CHIMICI		<16>
CHIMICA INORGANICA		<17>
LABORATORIO DI CHIMICA INORGANICA		<17>

È prevista una prova unica d'esame nei seguenti casi:

- <2> Chimica Generale ed Inorganica e Laboratorio di Chimica Generale ed Inorganica.
- <3> Chimica Analitica e Laboratorio di Chimica Analitica.
- <6> Fisica Generale 2° e Laboratorio di Fisica Generale.

- <8> Chimica Organica 1° e Laboratorio di Chimica Organica 1°.
- <10> Chimica Analitica Strumentale e Laboratorio di Chimica Analitica Strumentale.
- <12> Chimica Fisica 2° e Laboratorio di Chimica Fisica.
- <13> Chimica Organica 1° e Laboratorio di Chimica Organica 1°.
- <15> Chimica Industriale 1° e Laboratorio di Chimica Industriale 1°.
- <16> Processi e Impianti Industriali Chimici 1° e Laboratorio di Processi e Impianti Industriali.
- <17> Chimica Inorganica e Laboratorio di Chimica Inorganica.

#### Biennio di studi di applicazione

Per essere ammesso al Biennio di Studi di Applicazione, lo studente deve aver superato gli esami del Triennio o essere in difetto di non più di due di essi, che dovranno comunque essere sostenuti prima di quelli del Biennio.

All'atto dell'iscrizione al 4° anno, lo studente deve effettuare la scelta di uno degli indirizzi previsti o, in alternativa, presentare un piano di studi che, nell'ambito delle discipline attivate, rispetti il previsto numero di insegnamenti e il rapporto tra Corsi di Lezione e di Laboratorio.

Il Biennio presenta i seguenti tre indirizzi:

- a) RICERCA E SVILUPPO DEI MATERIALI
- b) RICERCA E SVILUPPO DEI PRODOTTI
- c) CHIMICO-BIOTECNOLOGICO

Sono insegnamenti Fondamentali Comuni a tutti gli indirizzi:

CHIMICA INDUSTRIALE 2° corso	<18>
LABORATORIO DI CHIMICA INDUSTRIALE 2° corso	<18>
PROCESSI E IMPIANTI INDUSTRIALI CHIMICI 2° corso	<19>

(È prevista una prova unica d'esame per Chimica Industriale 2° e Laboratorio di Chimica Industriale 2°)

Sono insegnamenti Irrinunciabili per gli indirizzi:

CHIMICA FISICA DEI MATERIALI (per ricerca e Sviluppo Materiali)  
 CHIMICA ORGANICA INDUSTRIALE (per Ricerca e Sviluppo Prodotti)  
 CHIMICA DELLE FERMENTAZIONI E MICROBIOLOGIA INDUSTRIALE (per Chimico-Biotecnologico)

Nel Biennio lo studente deve svolgere un lavoro di tesi sperimentale per un periodo di non meno di 9 mesi (minimo 1200 ore) su argomenti attinenti l'indirizzo o il Piano di Studio prescelto.

*Per essere ammesso all'Esame di Laurea lo studente deve aver seguito i Corsi e superato gli esami in tutti gli insegnamenti Fondamentali del Triennio Propedeutico, nei 3 insegnamenti Fondamentali del Biennio di Studi di Applicazione comuni a tutti gli indirizzi e in 6 insegnamenti di indirizzo, di cui uno abbinato ad un omonimo Corso di Laboratorio (con una prova unica d'esame per insegnamento e laboratorio omonimo).*

Saranno impartiti, subordinatamente all'approvazione Ministeriale, i seguenti insegnamenti di indirizzo:

#### a) RICERCA E SVILUPPO DEI MATERIALI

CHIMICA FISICA DEI MATERIALI\*  
 CHIMICA MACROMOLECOLARE  
 STRUTTURISTICA CHIMICA  
 STEREOCHIMICA INORGANICA#  
 CRISTALLOCHIMICA  
 FISICA DELLO STATO SOLIDO  
 METALLURGIA FISICA  
 CORROSIONE E PROTEZIONE DEI METALLI  
 ELETTROCHIMICA  
 CHIMICA DEI COLLOIDI E DELLE INTERFASI  
 CHIMICA DEI MATERIALI INORGANICI  
 ELETTROCHIMICA INDUSTRIALE  
 CHIMICA FISICA DEI POLIMERI  
 SCIENZA DEI METALLI  
 LABORATORIO DI CHIMICA FISICA DEI MATERIALI  
 LABORATORIO DI CHIMICA MACROMOLECOLARE  
 LABORATORIO DI ELETTROCHIMICA  
 \* = Insegnamento irrinunciabile dell'indirizzo  
 # = Corso di Laurea in Chimica

#### b) RICERCA E SVILUPPO DEI PRODOTTI

CHIMICA ORGANICA INDUSTRIALE\*  
 CHIMICA ORGANICA APPLICATA  
 CHIMICA MACROMOLECOLARE  
 CHIMICA DEI COMPOSTI ETEROCICLICI  
 CHIMICA ORGANICA 3° corso#  
 CHIMICA ORGANICA 4° corso#  
 CHIMICA INORGANICA 2° corso#  
 CHIMICA INORGANICA 3° corso#  
 CHIMICA DEI COMPOSTI ELEMENTOORGANICI  
 COMPLEMENTI DI CHIMICA ORGANICA  
 PREPARAZIONI DI CHIMICA ORGANICA  
 CHIMICA FISICA DEI POLIMERI  
 CATALISI  
 CINETICA CHIMICA#  
 ELETTROCHIMICA  
 ELETTROCHIMICA ORGANICA  
 LABORATORIO DI CHIMICA ORGANICA APPLICATA  
 LABORATORIO DI CATALISI  
 LABORATORIO DI CHIMICA MACROMOLECOLARE  
 \* = Insegnamento irrinunciabile dell'indirizzo  
 # = Corso di Laurea in Chimica

c) **CHIMICO-BIOTECNOLOGICO**

CHIMICA DELLE FERMENTAZIONI E MICROBIOLOGIA INDUSTRIALE\*

COMPLEMENTI DI CHIMICA ORGANICA

CHIMICA DEI PROCESSI BIOTECNOLOGICI

GENETICA

ENZIMOLOGIA

BIOLOGIA MOLECOLARE

CHIMICA DELLE SOSTANZE ORGANICHE NATURALI

CHIMICA ORGANICA 3° corso#

CHIMICA ORGANICA 4° corso#

STEREOCHIMICA ORGANICA#

BIOELETTROCHIMICA

TEORIA DEGLI ELETTROLITI

CINETICA CHIMICA#

CHIMICA BIOINORGANICA

CHIMICA BIOORGANICA

BIOCHIMICA INDUSTRIALE

LABORATORIO DI CHIMICA DELLE SOSTANZE ORGANICHE NATURALI

\* = Insegnamento irrinunciabile dell'Indirizzo

# = Corso di Laurea in Chimica

**PIANI DI STUDIO DEL CORSO DI LAUREA  
IN CHIMICA INDUSTRIALE  
(VECCHIO ORDINAMENTO)**

**Note illustrative**

La durata del corso degli studi per il conseguimento della laurea in Chimica Industriale è di cinque anni divisi in un biennio propedeutico e in un triennio di studi di applicazione.

Per quanto riguarda l'esenzione dalle tasse ed ogni altra provvidenza a favore degli studenti meritevoli, si stabilisce il piano di studio quantitativo seguente:

- non meno di 5 esami al termine del I anno
- non meno di 11 esami al termine del II anno
- non meno di 17 esami al termine del III anno
- non meno di 24 esami al termine del IV anno

Per il conseguimento della laurea in Chimica Industriale lo studente deve superare 33 esami scelti fra gli insegnamenti impartiti nell'Università degli Studi di Milano, tenendo conto delle norme qui di seguito riportate:

Nell'ordine vengono riportate:

- 1) *Le norme per la compilazione del piano di studio secondo lo statuto dell'Università degli Studi di Milano;*
- 2) *Le norme per la compilazione del piano di studio liberalizzato;*
- 3) *Le norme per la compilazione del piano di studio orientato:*
  - I - Organico
  - II - Elettrochimica Applicata
  - III - Sintesi Industriali e Processi
  - IV - Inorganico
- 4) *Le norme comuni a tutti i piani di studio.*

**1) NORME PER LA COMPILAZIONE DEL PIANO DI STUDIO  
SECONDO LO STATUTO (INSEGNAMENTI IMPARTITI  
NELL'ANNO ACCADEMICO 1991/92) (VECCHIO ORDINA-  
MENTO)**

**Biennio di studi propedeutici:** disattivato

*I ANNO* (disattivato a partire dall'a.a. 90-91)

*II ANNO* (disattivato a partire dall'a.a. 91-92)

**Triennio di studi di applicazione**

*III ANNO*

1	F02004	CHIMICA ANALITICA
2	F02015	ESERCITAZIONI DI ANALISI CHIMICA QUANTITATIVA
3	F02050	CHIMICA ORGANICA II
4	F02059	ESERCITAZIONI DI CHIM. INDUSTRIALE ORGANICA
5	F02051	CHIMICA FISICA I
6	F02053	ESERCITAZIONI DI CHIMICA FISICA I
7	F02037	CHIMICA FISICA INDUSTRIALE
8	.....	INSEGNAMENTO COMPLEMENTARE
9	.....	INSEGNAMENTO COMPLEMENTARE

*IV ANNO*

1	F02052	CHIMICA FISICA II
2	F02054	ESERCITAZIONI DI CHIMICA FISICA II
3	F02055	IMPIANTI INDUSTRIALI CHIM. CON ELEMENTI DI DISEGNO I
4	F02057	CHIMICA INDUSTRIALE ORGANICA
5	F02060	ESERCITAZIONI DI CHIMICA INDUSTRIALE INORGANICA
6	.....	INSEGNAMENTO COMPLEMENTARE
7	.....	INSEGNAMENTO COMPLEMENTARE



V ANNO

1	F02058	CHIMICA INDUSTRIALE INORGANICA
2	F02056	IMPIANTI IND.LI CHIM. CON ELEM. DI DISEGNO II
3	.....	INSEGNAMENTO COMPLEMENTARE

Si precisa: lo studente deve inoltre frequentare i laboratori per la preparazione della tesi di laurea.

**INSEGNAMENTI COMPLEMENTARI**  
(impartiti nell'anno Accademico 1991/92)

N.	Codice	Insegnamento	Anno
1	F02025	CHIMICA ORGANICA INDUSTRIALE	III
2	F02035	METALLOGRAFIA	III
3	FC2079	TEORIA DEGLI ELETTROLITI	IV
4	F02026	ELETTROCHIMICA	IV
5	F02034	MISURE ELETTRICHE	IV
6	F02066	PREPARAZIONI DI CHIM. ORGANICA	IV
7	F02036	CHIMICA DELLE MATERIE PLASTICHE	V
8	F02040	CORROSIONE E PROTEZIONE DEI METALLI	V
9	F02038	ELETTROCHIMICA INDUSTRIALE	V
10	F02080	CHIMICA ORGANICA APPLICATA	IV

**NORME PER LA COMPILAZIONE  
DEL PIANO DI STUDIO LIBERALIZZATO  
(VECCHIO ORDINAMENTO)**

Il corso di laurea in Chimica Industriale richiede il superamento di 33 esami. I relativi insegnamenti possono essere così suddivisi:

- A) insegnamenti fisico-matematici;
- B) insegnamenti chimici di base;
- C) insegnamenti a scelta;
- D) insegnamenti liberi.

Sul modulo del piano di studio è indicato l'anno consigliato per la frequenza di ciascun insegnamento. Eventuali spostamenti di anni sono consentiti purché sia rispettata una logica propedeutica.

*A) Insegnamenti fisico-matematici*

L'insegnamento della Matematica e della Fisica viene impartito mediante i corsi di:

- 1-2 ISTITUZIONI DI MATEMATICHE I e II (obbligatori)
- 3-4 ESERCITAZIONI DI MATEMATICHE I e II (obbligatori)
- 5-6 FISICA SPERIMENTALE I e II (obbligatori)
- 7 ESERCITAZIONI DI FISICA SPERIMENTALE.

I quattro insegnamenti di Matematica possono essere sostituiti con gli insegnamenti di: ANALISI MATEMATICA I e II, GEOMETRIA I e MECCANICA RAZIONALE dei corsi di laurea in Matematica o in Fisica.  
L'insegnamento di ESERCITAZIONI DI FISICA SPERIMENTALE può essere sostituito con un insegnamento dei gruppi C e D.

### B) Insegnamenti chimici di base

Gli insegnamenti del gruppo B, in numero 20, costituiscono il nucleo centrale del corso di laurea e sono obbligatori. Essi sono:

1-2	CHIMICA GENERALE ED INORGANICA I e II	I/II
3-4	CHIMICA ORGANICA I e II	II/III
5	COMPLEMENTI DI CHIMICA ORGANICA	II
6	CHIMICA ANALITICA	III
7-8	CHIMICA FISICA I e II	III/IV
9	CHIMICA FISICA INDUSTRIALE	III
10-11	IMPIANTI INDUSTRIALI CHIMICI I e II	IV/V
12	CHIMICA INDUSTRIALE ORGANICA	IV
13	CHIMICA INDUSTRIALE INORGANICA	V
14	ESERCITAZIONI DI PREPARAZIONI CHIMICHE	I
15	ESERC. DI ANALISI CHIMICA QUALITATIVA	II
16	ESERC. DI ANALISI CHIMICA QUANTITATIVA	III
17-18	ESERC. DI CHIMICA FISICA I e II	III/IV
19	ESERC. DI CHIMICA INDUSTRIALE ORGANICA	III
20	ESERC. DI CHIMICA INDUSTRIALE INORGANICA	IV

### C) Insegnamenti a scelta

Gli insegnamenti del gruppo C possono essere scelti dallo studente fra quelli dei corsi di laurea in Chimica Industriale e in Chimica.

L'elenco degli insegnamenti impartiti è indicato nel modulo del piano di studio (da richiedere alla Segreteria della Facoltà di via Celoria, 20).

Come criterio generale non può essere scelto un insegnamento del corso di laurea in Chimica se esiste un insegnamento equivalente per il corso di laurea in Chimica Industriale.

Eventuali deroghe saranno decise di volta in volta dal Consiglio del Corso di Laurea in Chimica Industriale.

Gli insegnamenti di Mineralogia con esercitazioni ed Esercitazioni di fisica sperimentale del Piano di Studio consigliato dal C.C.L., non sono ritenuti obbligatori e possono essere sostituiti con ugual numero di insegnamenti del Gruppo C.

### D) Insegnamenti liberi

Nel piano di studio può essere inserito anche un insegnamento libero (gruppo D), scelto dallo studente presso la Facoltà di Scienza M.F.N. dell'Università di Milano, compresi quelli liberi paraggiati del corso di laurea in Chimica e in Chimica Industriale.

A titolo riassuntivo, il numero degli insegnamenti del gruppo A può variare da 6 a 7, i corsi del gruppo B sono 20, quelli del gruppo C possono variare da 6 a 7 e quelli del gruppo D da 0 a 1 fino a raggiungere il numero totale di 33 esami.

### 3) NORME PER LA COMPILAZIONE DEL PIANO DI STUDIO ORIENTATO (VECCHIO ORDINAMENTO)

Per lo studente che desideri essere indirizzato verso un particolare settore della Chimica Industriale, vengono consigliati i seguenti piani di studio. In alcuni di questi piani sono contenute deroghe parziali ai criteri delle note illustrative precedenti.

Si intende che tali deroghe valgono *soltanto* per gli studenti che scelgono integralmente uno dei 4 piani proposti.

Si intende per "insegnamento libero" un insegnamento scelto tra quelli impartiti presso la Facoltà di Scienze M.F.N. dell'Università di Milano.

#### 1) Piano orientato: ORGANICO

Questo piano è orientato allo studio di problemi di base in Chimica organica e alla preparazione di tecnici con sbocchi professionali nel campo della chimica fine.

Gruppo A): Tutti gli insegnamenti fisico-matematici tranne ESERCITAZIONI DI FISICA SPERIMENTALE (6 insegnamenti) indicati a pag. 3.

Gruppo B): Tutti gli insegnamenti chimici di base (20 insegnamenti) indicati a pag. 4, ed inoltre, i sottoindicati:

1. CHIMICA ORGANICA INDUSTRIALE	III
2. CHIMICA ORGANICA APPLICATA	IV
3. CHIMICA DEI COMPOSTI ETEROCICLICI(*)	IV
4. PREPARAZIONE DI CHIMICA ORGANICA	IV
5. CHIMICA DELLE MATERIE PLASTICHE	V

più due insegnamenti a scelta tra:

- ESERC. DI TECNICHE E SINTESI SPECIALI ORGANICHE(*)	IV
- CHIMICA ORGANICA SUPERIORE(*)	IV
- CHIMICA DELLE FERMENTAZIONI(*)	V
- CHIMICA DELLE SOSTANZE ORGANICHE NATURALI(*)	V
- ELETTROCHIMICA	V
- INSEGNAMENTO LIBERO	

per un totale di 33 insegnamenti.

(\*) Corso di Laurea in Chimica

## II) Piano orientato: Elettrochimica Applicata

Questo piano è rivolto allo studio delle tecnologie elettrochimiche e dei problemi di preparazione e impiego dei materiali metallici con particolare riguardo ai fenomeni di corrosione. Sbocchi professionali nelle industrie elettrochimiche, galvaniche, metallurgiche e come specialisti dei problemi di corrosione.

Gruppo A) Tutti gli insegnamenti fisico-matematici tranne ESERCITAZIONI DI FISICA SPERIMENTALE (6 insegnamenti) indicati a pag. 3.

Gruppo B) Tutti gli insegnamenti chimici di base (20 insegnamenti) indicati a pag. 4, ed inoltre i sottoindicati:

1. ELETTROCHIMICA	IV
2. METALLOGRAFIA	III
3. CORROSIONE E PROTEZIONE DEI METALLI	V
4. ELETTROCHIMICA INDUSTRIALE	V

più tre insegnamenti a scelta tra:

- MINERALOGIA	I
- ESERCIT. DI FISICA SPERIMENTALE	II
- SCIENZA DEI METALLI(*)	IV
- CHIMICA FISICA DELLO STATO SOLIDO(*)	V
- MISURE ELETTRICHE	IV
- CHIMICA FISICA DELLE INTERFASI(*)	V
- TEORIA DEGLI ELETTROLITI	IV
- INSEGNAMENTO LIBERO	

per un totale di 33 insegnamenti.

(\*) Del Corso di Laurea in Chimica.

## III) Piano orientato: Sintesi Industriali e Processi

Questo piano è rivolto alla formazione di tecnici destinati alla ricerca e allo sviluppo di processi industriali e alla gestione di impianti chimici.

Gruppo A): Tutti gli insegnamenti fisico-matematici tranne ESERCITAZIONI DI FISICA SPERIMENTALE (6 insegnamenti) indicati a pag. 3.

Gruppo B): Tutti gli insegnamenti chimici di base (20 insegnamenti) indicati a pag. 3 ed inoltre i sottoindicati:

1. CHIMICA ORGANICA INDUSTRIALE	III
2. ELETTROCHIMICA	IV
3. CHIMICA DELLE MATERIE PLASTICHE	V
4. PREPARAZIONI DI CHIMICA ORGANICA	IV
5. MISURE ELETTRICHE	IV

più due insegnamenti a scelta tra:

- CINETICA CHIMICA(*)	IV
- ESERCITAZ. DI FISICA SPERIMENTALE	II
- CHIMICA ORGANICA APPLICATA	IV
- ELETTROCHIMICA INDUSTRIALE	V
- CORROSIONE E PROTEZIONE DEI METALLI	V
- TEORIA DEGLI ELETTROLITI	IV
- INSEGNAMENTO LIBERO	

per un totale di 33 insegnamenti.

(\*) Del Corso di Laurea in Chimica.

#### IV) Piano orientato: INORGANICO

Questo piano è orientato allo studio di problemi di base di chimica inorganica.

Gruppo A): Tutti gli insegnamenti fisico-matematici tranne ESERCITAZIONI DI FISICA SPERIMENTALE (6 insegnamenti) indicati a pag. 3.

Gruppo B): Tutti gli insegnamenti di base (20 insegnamenti) indicati a pag. 4 ed inoltre i sottoindicati:

1. CHIMICA ORGANICA INDUSTRIALE	III
2. ELETTROCHIMICA	IV
3. CHIMICA DEI COMPOSTI ELEMENTO-ORGANICI(*)	V
4. CHIMICA FISICA DELLO STATO SOLIDO(*)	V

più tre insegnamenti a scelta tra:

- MINERALOGIA	I
- ESERCITAZIONI DI FISICA SPERIMENTALE	II
- CHIMICA INORGANICA SUPERIORE(*)	III/IV
- STRUTTURISTICA CHIMICA(*)	III
- METALLOGRAFIA	III
- SCIENZA DEI METALLI(*)	IV
- INSEGNAMENTO LIBERO	

per un totale di 33 insegnamenti.

(\*) Del Corso di Laurea in Chimica.

#### 4) NORME COMUNI A TUTTI I PIANI DI STUDIO (VECCHIO ORDINAMENTO)

##### Biennio di studi propedeutici

Gli insegnamenti di ANALISI MATEMATICA I e II, di GEOMETRIA I e di MECCANICA RAZIONALE, dei corsi di laurea in Matematica o in Fisica, possono sostituire gli insegnamenti fondamentali di ISTITUZIONI DI MATEMATICHE I e II e di Esercitazioni di Matematiche I e II.

L'ammissione al corso di ESERCITAZIONI DI ANALISI CHIMICA QUALITATIVA implica la frequenza al corso di ESERCITAZIONI DI PREPARAZIONI CHIMICHE.

L'ammissione all'esame II implica il superamento dell'esame I.

L'ammissione all'esame di CHIMICA GENERALE ED INORGANICA II e di ESERCITAZIONI DI ANALISI CHIMICA QUALITATIVA implica il superamento degli esami di ESERCITAZIONI DI PREPARAZIONI CHIMICHE e di CHIMICA GENERALE ED INORGANICA I.

##### Triennio di studio di applicazione

L'ammissione al corso di ESERCITAZIONI DI CHIMICA INDUSTRIALE ORGANICA implica il superamento dell'esame di CHIMICA ORGANICA I.

L'ammissione all'esame II implica il superamento dell'esame I.

L'ammissione all'esame di IMPIANTI INDUSTRIALI CHIMICI CON ELEMENTI DI DISEGNO I implica il superamento dell'esame di CHIMICA FISICA INDUSTRIALE.

L'ammissione agli esami di CHIMICA FISICA I, ESERC. DI CHIMICA FISICA I e CHIMICA FISICA INDUSTRIALE implica il superamento degli esami di ISTITUZIONI DI MATEM. I ed ESERCITAZIONI DI MATEMATICHE I.

Per essere ammesso allo svolgimento della tesi di laurea lo studente deve aver superato almeno 28 esami previsti nel piano di studio, tra i quali 10 dei seguenti: Istituzioni di Matematiche I e II, Esercitazioni di Matematiche I e II, Fisica Sperimentale I e II, Chimica generale ed Inorganica I e II, Chimica Organica I e II, Chimica fisica I.

Inoltre, deve aver frequentato tutti i laboratori previsti (vedi regolamento per l'ammissione a svolgere la tesi di laurea).

*Si presentano pertanto agli studenti le seguenti possibilità:*

- Scelta del piano di studio secondo lo Statuto.
- Proposta di un piano di studi liberalizzato da sottoporre all'approvazione del Consiglio del Corso di Laurea in Chimica Industriale.
- Proposta di uno dei quattro piani orientati, illustrati al punto 3) da sottoporre all'approvazione del Consiglio del Corso di Laurea in Chimica Industriale.

Il modulo per la compilazione del piano di studio può essere richiesto alla Segreteria della Facoltà di Scienze M.F.N. in Via Celoria 20.

Lo studente nel compilare il modulo del Piano di Studio deve indicare:

- se sceglie un piano di studio liberalizzato oppure orientato (specificando quale);
- se è la prima proposta o se è una modifica alla prima proposta del proprio piano di studio approvato in precedenza;
- il numero d'ordine progressivo degli insegnamenti che intende seguire.

Il piano di studio diventa operativo ai fini della validità degli esami superati, solo dopo l'approvazione del Consiglio del Corso di Laurea in Chimica Industriale.

Qualora il piano di studio non fosse accettato, la Commissione Piani di Studio inviterà lo studente per concordare modifiche.

I piani di Studio proposti negli A.A. precedenti e già approvati dai Consigli del Corso di Laurea in Chimica Industriale sono ritenuti validi anche se non più conformi alle norme qui esposte.

Lo studente deve insegnare la prima proposta del Piano di Studio alla Segreteria della Facoltà di Scienze M.F.N., in via Celoria 20, entro il 31 dicembre dell'anno corrispondente al 1°, 2°, o 3° anno di corso.

Eventuali modifiche alla prima proposta approvata, potranno essere richieste presentando un nuovo piano di studio entro il 31 dicembre degli anni successivi. Le modifiche richieste in corso d'anno - con "domanda per esposto" - avranno validità, se approvate, dal 1° gennaio successivo.

## REGOLAMENTO PER LO SVOLGIMENTO DELLE TESI DI LAUREA IN CHIMICA INDUSTRIALE

Per essere ammesso al laboratorio di laurea lo studente deve aver superato almeno 28 esami previsti nel piano di studio, tra i quali almeno 10 dei seguenti 11 esami:

- 1 - ISTITUZIONI DI MATEMATICHE I
- 2 - ESERCITAZIONI DI MATEMATICHE I
- 3 - ISTITUZIONI DI MATEMATICHE II
- 4 - ESERCITAZIONI DI MATEMATICHE II
- 5 - 6 FISICA SPERIMENTALE I e II
- 7 - 8 CHIMICA GENERALE ED INORGANICA I e II
- 9 - 10 CHIMICA ORGANICA I e II
- 11 - CHIMICA FISICA I

e aver frequentato tutti i laboratori previsti dal piano di studio (Allegare una dichiarazione di frequenza rilasciata dal Docente dell'insegnamento quando il relativo esame non sia stato ancora sostenuto).

*Il tempo richiesto per lo svolgimento della tesi è un anno solare*

Le tesi di laurea si distinguono in:

- a. Tesi sperimentali interne,
- b. Tesi sperimentali esterne,
- c. Tesi compilative.

La TESI DI LAUREA SPERIMENTALE consiste in una dissertazione scritta sulle ricerche originali compiute dallo studente, nel laboratorio precisato nella domanda, sotto la guida del Relatore e/o del Correlatore ivi indicato.

- a. Sono considerate TESI SPERIMENTALI INTERNE quelle tesi che si svolgono presso gli Istituti, Dipartimenti e i Laboratori della Facoltà di Scienze dell'Università di Milano che fanno capo al Gruppo Chimico.
- b. Sono considerate TESI SPERIMENTALI ESTERNE quelle tesi che si svolgono presso altri Istituti/Dipartimenti della Facoltà di Scienze o presso Istituti/Dipartimenti di carattere chimico di altre Facoltà dell'Università di Milano o di altre Università o di Istituti Superiori e presso i Laboratori di Ricerca a carattere chimico di Enti Pubblici di Ricerca.
- c. La TESI DI LAUREA COMPILATIVA consiste in una dissertazione scritta di carattere critico sulle ricerche bibliografiche compiute dallo studente su un argomento chimico precisato nella domanda e sotto la guida del Relatore ivi indicato.

### TESI SPERIMENTALI INTERNE

Lo studente deve indicare nella domanda l'Istituto o il dipartimento presso cui intende svolgere la tesi, l'argomento delle ricerche e il nome del Relatore e del Correlatore.

A loro volta il Relatore e/o il Correlatore devono sottoscrivere la domanda. Con la firma apposta alla domanda d'ingresso in tesi, il Relatore garantisce di poter disporre di risorse finanziarie sufficienti per lo svolgimento delle ricerche

connesse alla tesi. Eventuali difficoltà che dovessero insorgere dovranno essere risolte all'interno dei singoli Istituti/Dipartimenti.

Possono essere *Relatori* di tesi sperimentali interne tutti i Docenti Ufficiali di materie chimiche di altri Corsi di Laurea, purché operino all'interno dei Dipartimenti degli Istituti Chimici.

Possono essere *Correlatori* di tesi sperimentali interne tutti i Docenti di cui sopra, i Ricercatori, gli Assistenti e, inoltre, i ricercatori non docenti dipendenti dell'Università di Milano o dal C.N.R., operanti nei Dipartimenti e negli Istituti Chimici, Cultori della materia.

L'orario di frequenza al laboratorio viene fissato dal Relatore o dal Correlatore, tenuto conto del tipo della ricerca e degli impegni didattici dello studente. Il Relatore e il Correlatore devono far pervenire un giudizio motivato sul candidato alla Commissione d'Esami di Laurea prima della discussione pubblica della tesi.

### TESI SPERIMENTALI ESTERNE

Su richiesta motivata dello studente (non più di una pagina dattiloscritta da allegare alla domanda) la Commissione per la tesi di Laurea può autorizzare lo svolgimento della tesi sperimentale al di fuori dei Dipartimenti o degli Istituti Chimici, nelle sedi indicate in precedenza.

Le tesi svolte presso le sedi ammesse, citate in precedenza, sotto la guida di un Docente Ufficiale della Facoltà di Scienze di Milano sono considerate tesi esterne solo per quanto riguarda le pratiche assicurative e l'autorizzazione del Direttore dell'Ente ospitante. Il Docente figura come Relatore Ufficiale della tesi. Alla domanda di ammissione al laboratorio di tesi di laurea lo studente deve allegare:

1. Motivazione di richiesta di tesi sperimentale esterna (una pagina dattiloscritta).
2. Programma dettagliato delle ricerche firmato dal Correlatore (una pagina dattiloscritta).
3. Una dichiarazione dell'Ente, presso cui viene svolta la tesi, che attesti la disponibilità dell'Ente ad ospitare il laureando e a concedergli l'uso delle attrezzature scientifiche.

Deve essere, inoltre, garantita la copertura assicurativa dello studente in caso di incidente (allegare quindi una dichiarazione del Direttore dell'Ente) oppure deve essere inoltrata al Rettore dell'Università di Milano, indicando luogo e periodo in cui viene compiuta la ricerca (in questo caso allegare alla domanda copia della richiesta).

La Commissione per la Tesi di Laurea decide in merito alla richiesta dello studente dopo aver accertato la validità delle motivazioni addotte dallo studente, la pertinenza dell'argomento di tesi con il suo curriculum studii, l'impossibilità di svolgere lo stesso argomento o argomenti affini presso il Dipartimento o gli Istituti Chimici.

Il *Relatore* per le tesi sperimentali esterne viene nominato all'atto dell'accetta-

zione della domanda dalla Commissione per la Tesi di Laurea tra i Docenti Ufficiali di materie chimiche del Corso di Laurea in CHIMICA, e in CHIMICA INDUSTRIALE, operanti nei Dipartimenti o negli Istituti Chimici.

Il *Correlatore* per le tesi sperimentali esterne può essere un Docente Ufficiale della Facoltà di Scienze dell'Università di Milano o di discipline di altre Facoltà o di altre Università o Istituti Superiori, oppure un Ricercatore non docente cultore della materia appartenente ad altri Enti di Ricerca.

ALMENO UN MESE PRIMA DELLA DATA DI DISCUSSIONE DELLA TESI, LO STUDENTE ILLUSTRERÀ I RISULTATI OTTENUTI ALLA PRESENZA DEL RELATORE E DEL CORRELATORE.

IN QUELLA SEDE IL RELATORE E IL CORRELATORE FORMULANO IL GIUDIZIO DA PRESENTARE ALLA COMMISSIONE D'ESAMI DI LAUREA.

### TESI COMPILATIVE

Lo studente che desidera svolgere la tesi compilativa deve allegare alla domanda di ammissione al laboratorio di tesi una succinta esposizione dell'argomento bibliografico che intende affrontare e deve indicare il nome del Relatore.

Il Relatore deve, a sua volta, firmare la domanda.

Possono essere *Relatori* di tesi compilative tutti i Docenti Ufficiali del Corso di Laurea in Chimica Industriale e i Docenti Ufficiali di materie chimiche di altri Corsi di Laurea operanti all'interno dei Dipartimenti o degli Istituti Chimici.

Il *Correlatore* per le tesi compilative viene nominato dalla Commissione per le Tesi di Laurea fra i medesimi professori.

Durante lo svolgimento della tesi, una proficua cooperazione deve essere mantenuta fra lo studente e il Relatore. A tal fine si fissano i seguenti momenti minimi di incontro fra il laureando e il docente:

1. Il momento della definizione dell'argomento di tesi e della programmazione della ricerca bibliografica.
2. Dopo la raccolta del materiale bibliografico e prima della sua organizzazione.
3. Almeno due volte nel corso dell'organizzazione del materiale e della stesura del testo.

ALMENO UN MESE PRIMA DELLA DATA DI DISCUSSIONE DELLA TESI, LO STUDENTE ILLUSTRERÀ LE CONCLUSIONI DELLE SUE RICERCHE ALLA PRESENZA DEL RELATORE E DEL CORRELATORE.

DOPO TALE RELAZIONE IL RELATORE E IL CORRELATORE POTRANNO ACCETTARE LA TESI, PROPORRE DELLE CORREZIONI OPPURE RIMANDARE L'ACCETTAZIONE IN CASO DI MANIFESTA INSUFFICIENZA.

LE COPIE DELLA DISSERTAZIONE SCRITTA DOVRANNO POI ESSERE INVIATE AL RELATORE E AL CORRELATORE PER LA DEFINITIVA APPROVAZIONE.

## ALTRE DISPOSIZIONI

- La tesi di laurea *compilativa* può essere svolta anche da quegli studenti che, dopo aver scelta una tesi non potessero continuare la ricerca in laboratorio. In tal caso si concede di ridurre il tempo necessario per lo svolgimento della tesi compilativa di un periodo uguale a quello trascorso in laboratorio. In ogni caso l'abbuono di tempo non potrà essere superiore a sei mesi.
- Le tesi svolte da studenti-lavoratori presso l'industria vengono considerate tesi compilative e assoggettate alla normativa più sopra esposta. Il contributo sperimentale dello studente può essere utilizzato come "notizie non ancora pubblicate". La pubblicazione di tali notizie avviene sotto la personale responsabilità dello studente, che deve munirsi delle autorizzazioni necessarie, in base al contratto di lavoro e alla deontologia professionale.
- Gli studenti che intendono proporre autonomamente degli argomenti di ricerca per la tesi di laurea devono allegare alla domanda di ammissione alla tesi una richiesta motivata e una illustrazione dell'argomento di ricerca e delle metodologie impiegate, oltre ad ogni elemento che possa risultare utile. La Commissione per la Tesi di Laurea esamina la fattibilità del progetto di ricerca e decide se accettare o meno la richiesta.

In caso positivo, la Commissione classifica la tesi in una delle tre categorie sopraesposte, assoggettandola alla relativa normativa.

## DATE DELLE SEDUTE DI LAUREA E DEGLI INGRESSI IN TESI PER IL 1992

	LAUREE Sedute	INGRESSI IN TESI	
		Date Ingressi	Presentazione delle domande
III Sessione 1990-91	27-28 Febbraio	1° Febbraio	1-31 Gennaio
I Sessione 1991-92	28-29 Maggio	2 Maggio	1-30 Aprile
	9-10 Luglio	1° Luglio	1-30 Giugno
II Sessione 1991-92	3-4 Novembre	2 Novembre	1-31 Ottobre

## CALENDARIO LEZIONI ED ESAMI A.A. 1991-92

### NUOVO ORDINAMENTO

#### Primo Anno

##### Lezioni

1° Semestre	7 ottobre 1991 - 18 gennaio 1992
2° Semestre	2 marzo 1992 - 12 giugno 1992

##### Esami

1ª Sessione	1 appello a gennaio 1992 2 appelli a febbraio 1992
2ª Sessione	1 appello a giugno 1992 2 appelli a luglio 1992
3ª Sessione	2 appelli a settembre 1992

#### Secondo Anno

##### Lezioni

1° Semestre	23 settembre 1991 - 20 dicembre 1991
2° Semestre	2 marzo 1992 - 12 giugno 1992

##### Esami

1ª Sessione	2 appelli a gennaio 1992 2 appelli a febbraio 1992
2ª Sessione	1 appello a giugno 1992 2 appelli a luglio 1992
3ª Sessione	1 appello a settembre 1992

### VECCHIO ORDINAMENTO

#### Terzo, Quarto e Quinto Anno

##### Lezioni

Dal 4.11.1991 al 12.6.1992 (senza l'interruzione di febbraio)

**PROGRAMMI DEGLI INSEGNAMENTI**  
**CORSO DI LAUREA IN CHIMICA INDUSTRIALE**

**Nota:** Per gli insegnamenti del 1° e del 2° anno sono riportati i programmi vigenti nell'ambito del Nuovo Ordinamento. Per gli insegnamenti del 3°, 4° e 5° anno i programmi si riferiscono al Vecchio Ordinamento.



## NUOVO ORDINAMENTO

### 1. CHIMICA GENERALE ED INORGANICA PROF. MICHELE ROSSI

Questo corso introduce gli argomenti fondamentali di chimica propedeutici agli approfondimenti che verranno svolti in programmi successivi.  
Parte integrante del programma viene trattata nel corso di Laboratorio di Chimica Generale che sviluppa le applicazioni pratiche e numeriche.

Struttura atomica della materia. Struttura dell'atomo secondo modelli di Bohr e ondulatorio.

Gli elementi, la loro distribuzione nell'universo e le proprietà periodiche.

Radioattività e chimica nucleare. Fissione e fusione nucleare.

Composti chimici, formule di Lewis, stereochimica. Regole di nomenclatura. Il legame chimico. Potenziale di ionizzazione, affinità elettronica ed elettronegatività degli atomi. Legame ionico e covalente. Energia reticolare.

Orbitali molecolari. Molecole biatomiche omo ed etero nucleari. Ibridazione. Legami covalenti delocalizzati. Legame chimico nei metalli.

Le proprietà generali dei liquidi. Tensione di vapore dei liquidi puri e delle soluzioni. Crioscopia, ebullioscopia e fenomeni osmotici. Le dispersioni colloidali e le loro proprietà.

La materia allo stato gassoso: proprietà e modelli molecolari. Liquefazione dei gas.

Stato solido, reticoli cristallini e celle elementari.

Termodinamica chimica. Entalpia, entropia ed energia libera. Attività specifiche e costante di equilibrio.

Equilibrio chimico nelle reazioni omogenee ed eterogenee. Influenza delle variabili T e P.

Velocità di reazione, ordine di reazione ed energia di attivazione. Catalisi. Acidi e basi. Sviluppo della teoria di Brønsted. Solventi non acquosi.

Elettroliti e conducibilità elettrica delle loro soluzioni.

Sistemi elettrochimici: elementi galvanici ed elettrolizzatori. Priorità nelle reazioni elettrochimiche.

Regola delle fasi e diagrammi di stato.

Le risorse naturali e le famiglie di composti inorganici di interesse industriale. I cicli naturali dell'acqua, dell'azoto, dello zolfo e le interazioni con i processi industriali. Problemi di inquinamento ambientale.

Le proprietà chimiche degli elementi più comuni e dei loro composti.

*Testi consigliati:*

L. Malatesta, S. Cenini, *Principi di Chimica Generale*.

L. Malatesta, *Chimica Inorganica*.

## 2. LABORATORIO DI CHIMICA GENERALE E INORGANICA

PROFF. GUIDO BANDITELLI E MADDALENA PIZZOTTI

Il corso è mirato all'approfondimento degli aspetti fondamentali e d'uso più comune trattati nel corso di Chimica Generale.

La parte principale sarà quindi basata sui fondamenti del calcolo stechiometrico con relative esercitazioni numeriche. Si affronteranno i seguenti argomenti:

### *Analisi dimensionale*

Sistemi internazionali di misura.

### *Mole*

Unità chimiche di massa. Pesi atomici e molecolari.

### *Formule chimiche*

Definizioni e metodi di calcolo.

### *Equazioni chimiche*

Significato, bilancio e relazioni tra masse. Reagente di reazione e agente limitante. Bilancio nelle reazioni tra ioni e nelle ossido-riduzioni.

### *Equivalenti chimici*

Peso equivalente in reazioni acido-base e di ossido-riduzione.

### *Soluzioni*

Modi di esprimere le concentrazioni. Diluizioni. Soluzioni titolate e loro impiego.

### *Gas ideali*

Leggi dei gas ideali. Miscugli gassosi. Gas umidi.

### *Soluzioni ideali*

Proprietà colligative. Legge di Raoult: ebullioscopia, crioscopia e pressione osmotica.

### *Termochimica*

Reazioni eso ed endotermiche. Leggi di Hess. Funzioni di stato  $\Delta H$ ,  $\Delta S$  e  $\Delta G$ .

### *Equilibrio chimico*

Principi generali: relazioni termodinamiche. Influenza delle variabili esterne. Equilibri eterogenei.

### *Equilibri ionici in soluzione acquosa*

Elettroliti forti e deboli. Prodotto ionico dell'acqua e pH.

### *Equilibrio acido-base*

Calcolo di pH in sistemi monoprotici, poliprotici e in miscele.

### *Equilibri eterogenei in soluzione*

Solubilità e prodotto di solubilità. Precipitazione e dissoluzione. Equilibri multipli in presenza di specie poco solubili. Costanti di formazione e dissociazione di ioni complessi.

### *Elettrochimica*

Leggi di Faraday. Potenziali normali di riduzione e f.e.m. della pila. Rendimento elettrochimico. Processi elettrolitici.

*Esercitazioni pratiche:* strettamente connesse alle esercitazioni numeriche, comportano l'acquisizione di fondamentali tecniche sperimentali e l'applicazione in esperimenti di laboratorio, di argomenti del corso di Chimica Generale. In particolare è prevista la sintesi e caratterizzazione di composti inorganici di interesse industriale.

### *Testi consigliati:*

M. Freni, A. Sacco, *Stechiometria*, Ed. Ambrosiana.

L. Rosemberg, *Chimica Generale*, Collana Schaum. Ed. ETAS Libri.

## 3. ISTITUZIONI DI MATEMATICHE (1° corso)

PROF. LEONARDO COLZANI

### *1) Concetti introduttivi*

Richiami sui numeri: numeri interi, fattoriale, coefficienti binomiali; razionali e reali, rappresentazione decimale; completezza dei reali; la potenza a esponente razionale o reale; numeri complessi: radici n-esime, teorema fondamentale dell'algebra.

Il concetto di funzione: funzioni, immagini e controimmagini; funzioni iniettive, suriettive e biiettive; funzione inversa, composizione di funzioni.

### *2) Funzioni reali di variabile reale*

Funzioni monotone, periodiche, pari o dispari; grafico.

Le funzioni elementari: potenze, esponenziali, logaritmi, funzioni circolari e loro inverse, funzioni iperboliche.

Limiti e continuità: proprietà e operazioni sui limiti, forme di indecisione; un caso particolare notevole: le successioni; successioni monotone, il numero "e"; continuità in un punto permanenza del segno; continuità su intervalli e relative proprietà.

Derivazione: derivata e differenziale, significato geometrico; regole di derivazione; proprietà delle funzioni derivabili: crescere e decrescere, concavità.

Studio del grafico di una funzione.

Integrazione integrale definito di Riemann; il teorema fondamentale del calcolo; primitiva di una funzione, primitive immediate; integrazione per sostituzione e per parti; integrali impropri (o generalizzati).

### *3) Serie*

Serie numeriche: carattere di una serie, esempi notevoli; criteri di convergenza: del confronto e suoi derivati, confronto con integrali impropri, serie a segni alternati.

Serie e successioni di funzioni: convergenza semplice, assoluta e uniforme; funzioni sviluppabili in serie di Taylor.

#### 4) *Primi elementi di algebra vettoriale*

I vettori: operazioni di somma e prodotto esterno; componenti, lo spazio  $R^3$ , dipendenza lineare; angolo fra due vettori: prodotto interno. Applicazioni alla geometria analitica: rette e piani.

### 4. FISICA GENERALE (1° corso)

PROF. GIORGIO SPINOLO

#### *Misure fisiche*

Grandezze fisiche. Unità di misura e campioni. Sistemi di unità e di misura. Calcolo dimensionale. Calcolo vettoriale e le principali operazioni.

#### *Cinematica*

Moto di un punto materiale, legge oraria, traiettoria, velocità, accelerazione, posizione. Studio del moto uniformemente accelerato del moto circolare e del moto armonico. Grandezze lineari e rotatorie.

#### *Dinamica*

Concetto di massa e di forza. Le tre leggi di Newton, unità di massa e di forza. Misura di masse e di forze. Forze centripete e reazioni centrifughe. Forze di attrito. Il pendolo semplice. Centro di massa. Quantità di moto. Forze impulsive e impulso. Urti e loro classificazione. Conservazione della quantità di moto. Lavoro ed energia. Teorema dell'energia cinetica. Energia potenziale elastica e di gravità. Legge di Hooke. Principio di conservazione dell'energia meccanica e sua estensione al caso di forze dissipative. Potenza. Equilibrio di un punto materiale. Baricentro. Corpi rigidi. Momento di una forza. Momento angolare e sua conservazione. Equazioni cardinali della dinamica dei corpi rigidi. Momento d'inerzia.

#### *Fluidi*

Concetto di fluido perfetto (attrito interno, comprimibilità). Pressione e principio di isotropia, di Pascal, di Stevino e di Archimede. Misura della pressione, esperimento di Torricelli. Regime stazionario e principio di Bernoulli con relative applicazioni. Legge di Torricelli. Regime microvorticoso e leggi di Poiseuille.

#### *Termologia*

Principio zero della termodinamica, concetto di calore e temperatura. Dilatazione termica. Scale empiriche di temperatura. Relazione fondamentale della termologia. Calore specifico e capacità termica. Propagazione del calore e conducibilità termica. Cambiamenti di stato fisico dei corpi. Punto triplo dell'acqua.

#### *Teoria cinetica dei gas*

Modello di gas perfetto e legge di Joule-Clausius. Energia interna di un gas perfetto, principio di equipartizione dell'energia.

#### *Primo principio della termodinamica*

Equilibrio termodinamico. Reversibilità, lavoro termodinamico. Primo principio. Equivalenza calore-lavoro. Espansione libera di Joule. Calori specifici dei gas perfetti. Il primo principio per i gas perfetti.

#### *Secondo principio della termodinamica*

Trasformazione di calore in lavoro: macchine termiche e rendimento. Il ciclo di Carnot. Enunciato di Clausius e di Kelvin. Macchine frigorifere e loro rendimento. Scala termodinamica delle temperature. Termometro a gas perfetto. Teorema di Carnot.

#### *Entropia*

Disuguaglianza di Clausius e il concetto di entropia. Variazioni di entropia di vari sistemi termodinamici. Rappresentazione nel piano di GIBBS. Entropia, lavoro, disordine, probabilità.

#### *Libri consigliati:*

R. Resnick, D. Halliday, Ed. Abrosiana, Milano.

M. Alonso, E.J. Finn, Addison-Wesley, Elementi di fisica, Ed. Bilingue.

### 5. CHIMICA ANALITICA

PROF. ANTONIO ARANEO

### 6. LABORATORIO DI CHIMICA ANALITICA

PROF. ANTONIO ARANEO

I corsi di Chimica Analitica e Laboratorio di Chimica Analitica sono strettamente collegati tra loro e trattano l'analisi chimica qualitativa e quantitativa.

#### *Programma di Chimica analitica qualitativa (24 lezioni)*

1) Generalità sull'analisi qualitativa. 2) Le soluzioni. 3) La solubilità dei composti. 4) La precipitazione. 5) Le soluzioni tampone. 6) I gruppi analitici. 7) La precipitazione. 8) La solubilità dei composti al variare dell'acidità. 9) Reazioni analitiche dei cationi alcalini e alcalino-terrosi. 10) I precipitati colloidali. 11) La precipitazione degli idrossidi e dei solfuri. 12) Gli idrossidi anfoteri. 13) Rea-

zioni degli elementi del gruppo analitico dell'alluminio. 14) Le reazioni di ossidazione. 15) Le reazioni di dismutazione. 16) Reazioni degli elementi del gruppo analitico dello zinco. 17) I composti di coordinazione nell'analisi qualitativa. 18) Solfossidi e solfoanidridi. 19) Reazioni degli elementi del gruppo analitico dell'arsenico. 20) Reazioni degli elementi del gruppo analitico del mercurio. 21) I cianocomplessi. 22) I reattivi organici. 23) Reazioni analitiche degli elementi meno comuni.

#### *Programma di Chimica analitica quantitativa (16 lezioni)*

1) Generalità sull'analisi quantitativa. 2) L'analisi gravimetrica. 3) Acidimetria e alcalimetria. 4) Le curve di titolazione. 5) Ossidimetria. 6) Permanganometria. 7) Iodometria. 8) Bicromatometria. 9) Precipitimetria. 10) Complessometria. 11) Le curve di titolazione complessometriche. 12) Indicatori metallobrocromici. 13) 14) 15) 16) Esercitazioni numeriche.

#### *Laboratorio di chimica analitica (24 esercitazioni: 95 ore)*

Il laboratorio di chimica analitica comprende 19 esercitazioni di analisi qualitativa e 5 esercitazioni di analisi quantitativa, per un totale di 24 esercitazioni. Le esercitazioni durano circa 4 ore ciascuno, per cui il corso si svolge in 95 ore, cioè 75 ore di analisi qualitativa e 20 ore di analisi quantitativa. Le 24 esercitazioni si svolgono in 12 settimane.

#### *Programma delle esercitazioni di analisi qualitativa (19 esercitazioni: 75 ore)*

1) Reazioni dei cationi alcalini. 2) Cloruri bromuri e ioduri. 3) Ricerca dei cationi alcalino-terrosi. 4) Ricerca analitica di ferro alluminio cromo. 5) Zinco cobalto nichel manganese. 6) Fosfati, ossalati, fluoruri, borati. 7) Arsenico, antimonio, stagno, mercurio. 8) Piombo, bismuto, rame, cadmio. 9) Argento, nitrati e nitriti. 10) Analisi di composti insolubili. 11) Ricerca dei cianocomplessi. 12) Solfati, solfuri, tiosolfati. 14) 15) 16) 17) 18) 19) Analisi complete.

#### *Programma delle esercitazioni di analisi quantitativa (5 esercitazioni: 20 ore)*

1) Analisi gravimetria. 2) Analisi acidimetrica. 3) Analisi precipitometrica. 4) Analisi permanganometrica. 5) Titolazione con EDTA.

## 7. ISTITUZIONI DI MATEMATICHE (2° corso)

PROF. ALBERTO ALESINA

### 5) Funzioni lineari di più variabili

Trasformazioni lineari e matrici; determinante.

Trasformazioni invertibili: matrice inversa.

Gruppi di trasformazioni.

### 6) Funzioni non lineari di più variabili

Campi scalari e campi vettoriali.

Calcolo differenziale: intorni e insiemi aperti in  $\mathbb{R}^n$ ; limite, continuità; approssi-

mazione lineare locale: il differenziale; derivate direzionali e parziali, matrice jacobiana; vettore gradiente e suo significato geometrico; estremi relativi, cenno al metodo del gradiente; derivate di funzioni composte: cambiamento di variabili espressioni differenziali, coordinate polari e cilindriche; funzioni implicite; estremi vincolati e assoluti.

Calcolo integrale: integrale di linea di forme differenziali; forme differenziali esatte, potenziale; integrali doppi; legame fra integrali doppi e di linea (teo. di Green).

### 7) Equazioni differenziali

Equazioni diff. ordinarie del primo ordine: teorema di esistenza e unicità della soluzione del problema di Cauchy; equazioni lineari del primo ordine; equazioni a variabili separabili; equazioni ai differenziali esatti.

Equazioni diff. ordinarie di ordine superiore: equazioni lineari a coefficienti costanti. Cenno alle equazioni alle derivate parziali.

## 8. CHIMICA ORGANICA (1° corso)

PROF. MAURO CINQUINI

### I - PRINCIPI GENERALI - IDROCARBURI

- 1) *Orbitali* atomici e orbitali molecolari. Legami covalenti. Stati di risonanza: Ibridazione  $sp^3$ ,  $sp^2$  e  $sp$  degli orbitali del carbonio (riepilogo dei concetti già noti).
- 2) *Alcani*. Il concetto di omologia. Nomenclatura IUPAC. Nomi di uso. Proprietà fisiche.
- 3) *Energia di legame*. Energia di dissociazione e energia media di legame.
- 4) Analisi conformazionale.
- 5) *Stereoisomeria*. Enantiometria e diastereoisomeria. Polarimetria. Nomenclatura di molecole chirali. Notazione di Fisher e di Cahn-Ingold-Prelog. Le regole di sequenza. Forme racemiche (conglomerati, racemati, soluzioni solide). Risoluzione di racemi. Reazioni stereospecifiche e stereoselettive.
- 6) *Alcheni*. Nomenclatura. Isomeria e geometrica e sua determinazione. Regole di sequenza e notazione configurazionali (isomeri Z e E).
- 7) *Dieni* isolati e coniugati. Nomenclatura.
- 8) *Alleni* (dieni cumulati).
- 9) *Dieni* coniugati. Il concetto di *risonanza*. Regole e considerazioni sulla risonanza. Determinazione sperimentale dell'energia di risonanza.
- 10) *Alchini*. Nomenclatura. Acidità.
- 11) *Idrocarburi aromatici*. Confronto con le proprietà chimiche degli alcheni. Il concetto di aromaticità.

- 12) *Cinetica e meccanismi di reazione in chimica organica*. Caratteri distintivi e classificazione delle reazioni organiche. Significato di reattivo e di substrato. Ordine e molecolarità di una reazione. Controllo cinetico e controllo termodinamico. Intermedi e stati di transizione.
- 13) *Inermedi di reazione*. Ioni carbonio, carbanioni, carbeni, radicali.
- 14) *Trasmissione intramolecolare di cariche elettriche*. Effetti induttivi e coniugativi. Iperconiugazione.
- 15) *Reattività chimica degli alcani*. Ossidazione: sintesi di idroperossidi. Alogenazione: meccanismo; reattività alcani primari, secondari e terziari, calcolo delle percentuali di isomeri in base ai rapporti di reattività. Nitrazione e solfanazione. Pirolisi (cracking), isomerizzazione.
- 16) *Sintesi degli alcani*. Idrogenazione di olefine; riduzione di alogenuri alchilici e di composti carbonilici; sintesi di Wurtz.
- 17) *Reattività degli alcheni*. Idrogenazione catalitica, con dimmide, con  $BH_3$ . Addizioni elettrofile: meccanismo, stereochimica e orientazione; regola di Markownikoff; effetto Kharasch; trasposizioni. Addizioni di  $Al_2$ ,  $HAl_2$ ,  $H_2SO_4$ ,  $H_2O$ ,  $CH_3COOH$ , alcheni, alcani. Alogenazione allilica. Idroboração. Ozonizzazione, ossidrilazione, e epossidazione di alcheni. Ciclopropanazione.
- 18) *Sintesi degli alcheni*. Fonti industriali (cracking termico e catalitico). Deidrogenazione e dealogenazione di alogeno-alcani; disidratazione di alcoli; pirolisi di esteri, xantogenati, N-ossidi, sali di ammonio e solfossidi, sintesi di Wittig e metodi vari di sintesi a partire da chetoni e aldeidi; riduzione di alchini (cis e trans riduzioni).
- 19) *Reattività chimica degli alchini*. Reagibilità verso reattivi elettrofilici, nucleofili e radicalici; acidità; idrogenazione catalitica; idrogenazione selettiva a olefine (cat. di Lindlar, Na e  $NH_3$  liq.) e loro aspetto stereochimico; addizione di alogeni, idracidi di alogenici, acqua, alcoli e mercaptani, borani, isomerizzazione.
- 20) *Sintesi degli alchini*. Dealogenazione di alogenuri alchilici e di alogeno-etilici; alchilazione di 1-alchini.
- 21) *Dieni coniugati*. Sintesi. Proprietà chimiche: 1, 2- e 1, 4 addizioni; 1, 4-cicloaddizioni (sintesi dieniche e loro stereochimica).
- 22) *Aleni*. Sintesi, interconversione ad acetileni.

## II - DERIVATI FUNZIONALI DEGLI IDROCARBURI ALIFATICI

- 1) *Alogeno-derivati*. Proprietà fisiche, termini principali. Considerazioni generali sulle proprietà chimiche. Reazioni di sostituzione nucleofila alifatica e di eliminazione. Meccanismi  $S_N2$ ,  $S_N1$ . Stereochimica. Effetti strutturali e del solvente. Solventi dipolari aproci. Eteri corona criptanti (cenni). Catalisi per trasferimento di fase.

Trasposizioni. Partecipazione del gruppo vicino. Meccanismi  $E_1$ ,  $E_2$ ,  $E_{1CB}$ . Orientamento e reattività (regole di Saytzeff e di Hoffmann). Stereochimica. Confronto eliminazione-sostituzione. Eliminazioni intramolecolari (esteri, xantati, N-ossidi, solfossidi).

*Sintesi*: alogenazione di alcani, alcheni e alcoli; scambio di alogeni (r. di Finkelstein).

- 2) *Composti organo-metallici*. Natura del legame carbonio-elemento. Proprietà fisiche e reattività.

*I reattivi di Grignard*: sintesi, struttura e comportamento chimico. Sodio- e litio-alchili.

Zinco e cadmio-alchili (reazione di Reformatzky e sintesi di chetoni alifatici).

Sintesi e reattività di cuprati.

- 3) *Alcoli*. Proprietà fisiche. Legami a idrogeno.

*Proprietà chimiche*: acidità e basicità; formazione di eteri (r. di Williamson); esterificazione; formazione di alogenuri alchilici (meccanismo e stereochimica delle reazioni con idracidi e con alogenuri di fosforo e di zolfo); disidratazione, ossidazione ad aldeidi, acidi carbossilici.

*Metodi generali di sintesi*: con reattivi di Grignard; idratazione e idroboração di alcheni; idrogenazione catalitica e riduzione con idruri metallici dei derivati carbonilici; riduzione di Meerwein-Ponndorf-Verley (e ossidazione di Oppenauer); idrolisi di esteri; glicoli da alcheni; condensazione aldolica; sintesi di Reformatzky.

- 4) *Eteri*. Proprietà fisiche.

*Proprietà chimiche*: basicità; sali di ossonio; scissione acida; formazione di perossidi.

*Sintesi*: processi industriali, sintesi di Williamson, addizioni di alcoli agli alcheni. Ossirani (sintesi e proprietà).

- 5) *Aldeidi e chetoni*. Nomenclatura. Proprietà fisiche.

*Proprietà chimiche*: polarità e polarizzazione del legame  $C=O$ ; tautomeria cheto-enolica; ossidazione di aldeidi ad acidi carbossilici (Reattivi di Tollens e di Fehling); ossidazione di chetoni; riduzione ad alcool; riduzione a pinacoli; riduzione a idrocarburi (r. di Clemmensen, r. di Wolff-Kishner; desolforizzazione dei tiacetali); addizione di acqua, addizione di alcoli, glicoli e tioli; addizione di acido cianidrico e condensazione acilonica; addizione di bisolfito, addizione di ammoniacale, ammine, idrossilammina, idrazina, ecc. (ossime e loro isomeria, trasposizione di Beckmann, enammine); conversione a dialogeno-derivati; addizione di composti organo-metallici; addizione di ilidi di fosfonio (r. di Wittig), di solfonio e di osso-solfonio; reazione di Darzens; addizione di acetileni;  $\alpha$ -alogenazione; condensazione aldolica, crotonica, aldolica mista e reazioni analoghe (Perkin-Claisen, Doebner-Knoevenagel).

*Carbonili mascherati*

*Inversione di reattività*

*Sintesi delle aldeidi*: ossidazione e deidrogenazione di alcoli primari ( $CrO_3$ ,  $MnO_2$ , r. di Oppenauer); scissione ossidativa dei glicoli; ozonolisi di olefi-

ne; riduzione di cloruri acilici; riduzione di nitrili e di amidi; sintesi da ortofornati alchilici e reattivi di Grignard.

*Sintesi dei chetoni*: ossidazione e deidrogenazione di alcoli secondari; scissione ossidativa di glicoli; ozonolisi di olefine; scissione di  $\beta$ -cheto-esteri; reazione dei reattivi di Grignard con i nitrili; reazione dei cadmio-alchili con i cloruri acilici; trasposizione pinacolonica di 1,2-glicoli; idratazione di alchini.

6) *Acidi carbossilici*. Nomenclatura.

*Proprietà chimiche*: acidità e basicità; conversione ad esteri, cloruri, ammidi, anidridi; riduzione ed alcoli;  $\alpha$ -alogenazione (r. di Hell-Volhard-Zelinsky); decarbossilazione.

*Sintesi*: idrolisi di nitrili, esteri, cloruri acilici e ammidi, carbonatazione di derivati organo-metallici; sintesi acetacetica e malonica; allungamento di catena (r. di Arndt-Eistert); ossidazione di alcoli, aldeidi e alcheni; r. alformio; r. di Bayer-Williger.

7) *Alogenuri acilici, anidridi e ammidi* (sintesi e proprietà).

8) *Esteri*. Proprietà fisiche.

*Proprietà chimiche*: idrolisi acida e alcalina, amminolisi, transesterificazione, reazione con derivati organo-metallici, riduzione, condensazione di Claisen e Dieckman.

*Sintesi*: da acidi carbossilici e alcoli, da acidi carbossilici e diazometano, dai cloruri e dalle anidridi degli acidi, per transesterificazione.

9) *Ammine*. Proprietà fisiche e spettroscopiche.

*Proprietà chimiche*: basicità e acidità; alchilazione, acilazione; reazioni con acido nitroso (diazo-composti alifatici); ossidazione (N-ossidi); conversione a carbilammine; basi di Mannich; eliminazioni da composti quaternari (elim. di Hofmann e di Cope).

*Sintesi*: alchilazione ammoniacca e ammine; sintesi di Gabriel; riduzione di nitrilcomposti, ossime, nitrili, ammidi, ecc.; amminazione riduttiva di derivati carbonilici; demolizione di Hofmann, Curtius, Schmidt; trasposizione di Bekmann delle ossime.

10) *Immine, enammine* (sintesi e proprietà).

11) *Nitre-composti*. Proprietà chimiche e fisiche. Sintesi. Tautomeria.

12) *Ossime* (sintesi e proprietà).

13) *Nitrili* (sintesi e proprietà).

14) *Amminoacidi - Peptidi - Proteine*: Generalità, applicazioni, nomenclatura, stereochimica e proprietà acido-base degli amminoacidi. Sintesi classiche, produzione industriale, risoluzione ottica, sintesi asimmetrica degli amminoacidi. Reattività chimica degli amminoacidi, formazione dei peptidi mediante reazioni classiche ed in fase solida, peptidi naturali, cenni sulla struttura delle proteine.

15) *Carboidrati*: Monosaccaridi: classificazione, nomenclatura, rappresentazione steriche, strutture e proprietà. Oligo- e polisaccaridi: principali strutture.

16) *Grassi - saponi*: Generalità dei grassi naturali, grassi alimentari. Saponi e detergenti sintetici.

*Testi consigliati e di consultazione*:

T.W.G. Solomons, *Chimica organica*, E. Grosso, Bologna, 1988.

N.L. Allinger, M.P. Cava, D.C. De Jongh, C.R. Honhson, N.A. Lebel e C.L. Stevens, *Chimica Organica*, Ed. Zanichelli, Bologna, 1981.

A.L. Ternay, *Chimica Organica Contemporanea*, Ed. Ambrosiana, Milano, 1982.

K.P.C. Vollhardt, *Chimica Organica*, Ed. Zanichelli, Bologna, 1990.

## 9. LABORATORIO DI CHIMICA ORGANICA (1° corso)

PROF. PAOLO MANITTO

Il corso è semestrale e si articola in lezioni teoriche ed esercitazioni di laboratorio (75 ore).

*Lezioni teoriche*

- Microanalisi, determinazione della formula minima, del numero di insaturazioni, peso e formula molecolare.

- Cenni di spettroscopia per la caratterizzazione di sostanze organiche.

- Problemi di sicurezza nel laboratorio di chimica organica.

- Introduzione alle seguenti tecniche sperimentali: cristallizzazione, estrazione con solvente, distillazione semplice e frazionata nel pieno e nel vuoto, cromatografia su strato sottile e su colonna.

- Problemi sperimentali collegati alle seguenti reazioni: ossidazioni, riduzioni, reazioni di condensazione, reazioni di Grignard.

*Esercitazioni di laboratorio*

1) Esecuzione individuale da parte dello studente delle operazioni fondamentali del laboratorio di chimica organica quali: determinazione del punto di fusione, cristallizzazione, estrazioni con solvente, distillazione semplice e frazionata nel pieno e nel vuoto, cromatografia su strato sottile, cromatografia su colonna.

2) Esecuzione da parte dello studente di alcune delle più comuni reazioni della chimica organica (riduzioni e ossidazioni di gruppi funzionali, sostituzioni nucleofile, condensazioni crotoniche e di Claisen, alchilazioni con reagenti di Grignard).

3) Caratterizzazione dei prodotti sintetizzati mediante metodi spettroscopici.

*Libro di testo*:

D.S. Pasto, C.R. Johnson, *Laboratory Text for Organic Chemistry*, Prentice-Hall, 1979.

*Libro consigliato per la consultazione:*

B.S. Firniss. A.J. Hannaford, P.W.G. Smith, A.R. Tatchell, *Vogel's Textbook of Practical Organic Chemistry*, 5th ed., Longman Scientific & Technical, 1989.

## 10. FISICA GENERALE (2° corso)

PROF. LINA ZUFFI IN CASTIGNANI

### *Campo elettrostatico*

Coordinate cartesiane, sferiche, cilindriche.

Il campo elettrostatico. Legge di Coulomb. Campo e potenziale elettrostatico. Teorema di Gauss.

Linee di forza.

Dipolo elettrico e suo campo.

Induzione totale, esperienze e applicazioni.

Campo dato da uno strato semplice e doppio di carica.

Campo di una sfera carica.

Campo alla superficie di un conduttore. Proprietà delle punte.

Condensatori piani, sferici, cilindrici. Condensatori in serie in parallelo.

Energia immagazzinata di un condensatore. Energia di un campo elettrostatico.

I dielettrici. Dipoli indotti. Dipoli permanenti.

Polarizzazione elettrica e induzione elettrica.

Generalizzazione delle leggi elettrostatiche ai dielettrici omogenei.

### *Elettromagnetismo*

Intensità di corrente. Densità di corrente.

Legge di Ohm e sua generalizzazione.

Forza elettromotrice.

Resistenze in serie e in parallelo.

Leggi di Kirchhoff.

Influenza della temperatura sulla resistenza. Superconduttività.

Effetti termici, chimici e magnetici delle correnti.

Trasformazione dell'energia elettrica in calore. Legge di Joule.

Il vettore induzione magnetica B.

Campo magnetico generato da una corrente.

Leggi di Laplace.

Legge di Biot e Savart.

Campo al centro di una spira percorsa da corrente.

Forza tra due elementi di filo percorsi da corrente.

Non conservatività del vettore B. Legge di circuitazione di Ampère e sue applicazioni.

Magneti naturali. Analogia tra il campo di una spira e di un dipolo.

Introduzione del mezzo nelle definizioni di B e H.

Permeabilità e suscettività magnetica.

Corpi dia, para e ferromagnetici. Ciclo di isteresi.

Campo B e H in un solenoide in presenza di un mezzo polarizzabile.

Dipendenza dal mezzo delle forze tra magneti, tra correnti e tra correnti e magneti.

Variazione di flusso di induzione concatenato con un circuito.

Induzione elettromagnetica.

Forza elettromotrice di induzione. Legge di Faraday. Sua forma differenziale.

Esperienze elementari di autoinduzione. Definizioni di induttanza e sua misura.

Correnti di Foucault e loro conseguenze.

Chiusura ed apertura di un circuito con induttanza.

Energia del campo magnetico.

Mutua induzione. Cenni alla teoria del trasformatore.

Generazione di correnti alternate.

Valori efficaci e potenza di una corrente alternata. Corrente dewattata.

Circuito con resistenza e induttanza, resistenza a capacità, resistenza induttanza e capacità.

Impedenza e reattanza.

Oscillazione smorzate e forzate. Analogia meccanica.

Misura di correnti continue e alternate.

Equazioni di Maxwell.

Correnti di conduzione e di spostamento. Vettore di Poynting.

Soluzione delle equazioni di Maxwell per onde polarizzate piane in un dielettrico omogeneo.

Generalità sulle onde elettromagnetiche.

Teoria elettromagnetica della luce.

Formula di Larmor.

Cenni di teoria elettronica dei metalli. Effetto Volta. Catena metallica. Effetto

Seebeck e termoelettronico. Coppie termoelettriche. Effetto termoionico e fotoelettrico.

Moto di una particella carica in un campo elettrico e magnetico. Forza di Lorentz. Effetto Hall.

Determinazione della carica elementare. Esperienza di Millikan.

Determinazione del rapporto e/m dell'elettrone.

### *Ottica*

Descrizione delle varie radiazioni elettromagnetiche, loro sorgenti e rilevatori.

Il laser.

Leggi dell'ottica geometrica. Riflessione e rifrazione.

Velocità di propagazione. Indice di rifrazione assoluto e relativo.

Analogo limite.

Cammino ottico. Principio di Fermat.

Prisma. Angolo di deviazione minima. Dispersione.

Specchi sferici.

Lenti sottili. Formula dei punti coniugati. Def. di diottria.

Interferenza luminosa. Esperienza di Young.

Teoria elementare dell'interferenza.

Diffrazione. Principio di Huygens-Fresnel. Sue applicazioni.  
Diffrazione da una fenditura. Reticolo di diffrazione.  
Polarizzazione della luce. Legge di Malus.  
Polarizzazione a nicol.  
Polarizzazione rettilinea circolare ed ellittica.  
Rotazione del piano di polarizzazione. Polarimetri.  
Birifrangenza.  
Cenni di ottica dei raggi X. Polarizzazione. Legge di Bragg.

#### *Cenni di Struttura della Materia*

Atomo e nucleo. Livelli quantici. Atomo di Bohr.  
Radioattività  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ .  
Energia di legame. Isotopi. Fissione e fusione.

#### *Unità di misura*

Durante il corso si farà uso principalmente del Sistema Internazionale di unità (SI), ma è indispensabile la conoscenza dei sistemi (C.G.S.) es, (C.G.S.) em, e di Gauss.

#### *Libri di testo consigliati:*

E. Amaldi, R. Bizzarri, G. Pizzella, *Fisica generale - Elettromagnetismo - Relatività Ottica*, Zanichelli Editore.  
M. Alonso, E.J. Finn, *Elementi di Fisica per l'Università*, Vol. II, Addison Wesley Pub. Company.

## 11. LABORATORIO DI FISICA GENERALE

PROF.SSA EMANUELA MERONI

#### *Le variabili a una dimensione*

Variabili statistiche e variabili casuali. Gli indici di posizione e di dispersione. Momenti e funzioni ad esse collegate. Le principali variabili casuali.

#### *Le variabili a due dimensioni*

Teoria della connessione. Teoria della correlazione e della regressione.

#### *Operazioni sulle variabili casuali*

Funzioni e successioni di variabili casuali.

#### *Inferenza statistica*

Distribuzioni campionarie. Teoria della stima. Teoria della verifica delle ipotesi.

#### *Il piano degli esperimenti*

Esperimento casuale semplice. Esperimento casuale a scomparti. Esperimento a quadrati latini. Esperimento classico. Esperimento fattoriale. Esercizi sulla programmazione degli esperimenti.

#### *Testi consigliati:*

Fausto Ricci, *Statistica ed elaborazione statistica delle informazioni*, Ed. Zanichelli.  
Murray R. Spiegel, *Teoria e problemi di probabilità e Statistica*, Collana Schaum.

## 12. CALCOLO NUMERICO E PROGRAMMAZIONE

PROF. FRANCO CAZZANIGA

Il programma consta di tre parti distinte, ma interdipendenti fra di loro.

#### *1) Laboratorio di Calcolo*

Cenni di programmazione strutturata in FORTRAN. Uso del pacchetto applicativo Matlab.

#### *2) Analisi Numerica*

Nozioni introduttive sugli errori. Tipi di errore. Stima e maggiorazione. Mal condizionamento ed instabilità.

Sistemi Lineari. Calcolo di autovalori ed autovettrici. Metodi diretti e metodi iterativi.

Soluzioni di equazioni. Metodi iterativi.

Approssimazione di funzioni. Cenni alle funzioni spline.

Integrazione numerica. Soluzioni approssimate di un problema di Cauchy.

Metodi ad un passo e a più passi. Cenni alle equazioni differenziali di ordine superiore al primo. Cenni ai sistemi di equazioni differenziali e alle equazioni differenziali alle derivate parziali.

#### *3) Analisi dei dati sperimentali e approssimazione*

Il metodo dei minimi quadrati e approssimazione.

Il metodo dei minimi quadrati. Trasformate e serie di Fourier. Trasformate di Fourier discrete. Cenni alla trasformata rapida di Fourier.

## 13. CHIMICA FISICA (1° corso)

PROF. GIORGIO FAVINI

#### *Teoria quantistica*

Introduzione. Principi. Tecniche ed applicazioni.

#### *Strutture molecolari*

Molecola-ione idrogeno. Molecole biatomiche omonucleari ed eteronucleari.

Molecole poliatomiche. Idrocarburi saturi, insaturi e aromatici. Metalli.



#### *Determinazione delle strutture molecolari*

Spettri rotazionali. Vibrazionali. Elettronici. Tecniche di risonanza, di diffrazione. Proprietà elettriche e magnetiche.

*Calcolo di semplici funzioni di ripartizione in termodinamica statistica*

*Testo consigliato:*

ATKINS (seconda edizione italiana): Cap. 13, 14, 16, 18, 19, 20, 22, 23, 24.

## 14. CHIMICA ANALITICA STRUMENTALE

PROF. MICHELE GULLOTTI

### 1) *Metodi Elettrochimici*

Aspetti generali dei metodi elettrochimici.

a) *Potenzimetria*: Equazione di Nernst. Elettrodi di riferimento e misura. Elettrodi ionoselettivi. Titolazioni potenziometriche. Strumentazione.

b) *Conduttimetria*: Teoria. Titolazioni conduttimetriche. Strumentazione.

c) *Polarografia e Voltammetria ciclica*: Introduzione e basi teoriche. Metodi polarografici quali e quantitativi. Strumentazione.

### 2) *Metodi Spettroscopici*

Introduzione. Applicazione della teoria quantistica alla spettroscopia. Strumentazione.

a) *Spettroscopia Atomica e di Emissione*: Principi e teoria. Processi di atomizzazione. Sorgenti di radiazione. Applicazioni analitiche quali e quantitative.

b) *Spettroscopia di assorbimento UV-VIS*: Assorbimento molecolare della radiazione. Spettri elettronici. Effetto della struttura sull'assorbimento. Regole di selezione. Intensità delle transizioni elettroniche. Studio di cromofori. Applicazioni spettrofotometriche. Apparecchiature e strumenti. Analisi quantitative.

c) *Spettroscopia Infrarossa e Raman*: Teoria e fondamenti. Legami molecolari e struttura molecolare. Spettri vibrazionali. Regole di selezione e intensità delle transizioni vibrazionali. Sistemi di campionamento. Strumentazione e analisi quantitative. Interpretazione degli spettri infrarossi.

d) *Fluorescenza e Fosforescenza*: Teoria. Strumentazione. Applicazioni.

e) *Spettroscopia di Risonanza Magnetica Nucleare (NMR)*: Proprietà magnetiche dei nuclei. Interpretazione classica e quantomeccanica della risonanza magnetica nucleare. Strumentazione. Spostamento chimico. Dipendenza dal tempo dei feromenti NMR. Accoppiamento spin-spin. Applicazioni analitiche. Interpretazione degli spettri NMR di molecole organiche.

f) *Spettroscopia di Risonanza di Spin Elettronico (ESR)*: Introduzione. Condi-

zioni di risonanza. Equilibrio termico e rilassamento di spin. Strumentazione. Applicazioni analitiche.

### 3) *Spettrometria*

Introduzione. Aspetti teorici. Il principio fisico del metodo. Strumentazione. Relazione tra struttura molecolare e frammentazione. Applicazioni analitiche. Interpretazione di spettri di massa.

### 4) *Cromatografia*

Classificazioni dei metodi cromatografici. Tecniche di separazione.

a) *Cromatografia liquido-solido*: Tecniche di adsorbimento. Cromatografia su colonna. Scambiatori ionici inorganici, organici, e polimerici. Proprietà degli scambiatori. Applicazioni.

b) *Cromatografia liquido-liquido*: Teoria della ripartizione. Cromatografia su colonna, su carta, su strato sottile. Cromatografia liquida sotto pressione HPLC. Applicazioni analitiche della cromatografia HPLC. Applicazioni analitiche della cromatografia HPLC.

c) *Gas-Cromatografia*: Introduzione. Aspetti di equilibrio e meccanicistici. Termodinamica e cinetica della gas-cromatografia. Strumentazione. Rivelatori. Analisi quali e quantitative.

*Testi consigliati:*

H.H. Bauer, G.D. Christin, J.E. O'Reilly, *Analisi strumentale*, Ed. Piccin.

R. Ugo, *Analisi Chimica Strumentale*, Ed. CEA.

H.H. Willard, L.L. Merritt Jr., J.A. Dean, F.A. Settle Jr., *Instrumental Methods of Analysis*, Ed. International Thomson Organization.

H.A. Strobel, W.R. Heineman, *Chemical Instrumentation: A Systematic Approach*, Textbook of Quantitative Chemical Analysis, Longman U.K.

## 15. LABORATORIO DI CHIMICA ANALITICA STRUMENTALE

PROF. MICHELE GULLOTTI

### *Metodologie Elettroanalitiche*

1) Titolazione potenziometrica acido-base forte.

2) Titolazione potenziometrica di una miscela di acidi (forte e debole) con base forte.

3) Titolazione potenziometrica di ossido riduzione.

4) Titolazione potenziometrica di precipitazione.

5) Titolazione conduttimetrica di un acido debolissimo con base forte.

- 6) Determinazione polarografica quantitativa di un metallo in soluzione.

#### *Metodologie spettroscopiche*

- 1) Determinazione per assorbimento atomico di tracce di metalli in soluzione.
- 2) Applicazione della legge di Lambert-Beer ad una miscela di due componenti in soluzione.
- 3) Determinazione spettrofotometrica del pKa di un indicatore.
- 4) Determinazione quantitativa di una miscela di xileni per infrarosso.
- 5) Registrazione ed interpretazione di spettri NMR.
- 6) Registrazione ed interpretazione di spettri di massa.

#### *Cromatografia*

- 1) Determinazione e separazione di una miscela per HPLC.
- 2) Determinazione gas-cromatografica di una miscela di solventi.

## 16. CHIMICA BIOLOGICA

PROF. BRUNO CURTI

#### *Introduzione*

Scopo e campi di studio della biochimica. Legami chimici e struttura biologica. Bioelementi e biomolecole. Il ruolo dell'acqua nei processi biologici.

#### *Aspetti termodinamici dei processi biologici*

I fosfo-composti ad alto contenuto energetico. L'ATP ed i composti ad alto potenziale di trasferimento di gruppo.

#### *Acidi nucleici*

Struttura dei vari tipi di DNA e RNA. I livelli di organizzazione strutturale del DNA.

#### *Proteine*

Livelli di organizzazione strutturale delle proteine: struttura primaria, secondaria, super secondaria, terziaria e quaternaria. I fattori determinanti la struttura secondaria e terziaria delle proteine. Evoluzione e funzione delle proteine. Alcuni esempi di proteine: collagene, mioglobina, emoglobina, immunoglobuline.

#### *Enzimi*

Struttura e classificazione degli enzimi. Coenzimi e cofattori. Cinetica enzimatica. Inibizione enzimatica. Regolazione dell'attività enzimatica: allosteria, modificazioni covalenti, sistemi controllo dell'induzione e degradazione degli enzimi.

Ribozima ed anticorpi catalitici. Alcuni esempi di proteine catalitiche: lisozima, proteasi seriniche, carbossipeptidasi, glutatione riduttasi.

#### *Membrane biologiche*

Struttura e funzione. Cenni sul trasporto di membrana.

#### *Metabolismo*

Aspetti generali e metodi di studio.

#### *Metabolismo dei carboidrati*

Glicolisi e fermentazione alcolica. Regolazione della glicolisi. Catabolismo dei polisaccaridi. Processi ossidativi: ossidazione del piruvato, ciclo dell'acido citrico, vie anaplerotiche, ciclo del gliossilato. Metabolismo dei pentoso fosfati. Biosintesi dei carboidrati: gluconeogenesi e sua regolazione, cicli futili, biosintesi del glicogeno. Controllo ormonale del metabolismo del glicogeno.

#### *Ossidazioni biologiche*

Catena respiratoria: trasporto degli elettroni e fosforilazione ossidativa. L'ossigeno quale substrato di altre reazioni metaboliche.

#### *Metabolismo dei lipidi*

Metabolismo dei trigliceridi. Ossidazione degli acidi grassi. Metabolismo dei corpi chetonici. Biosintesi degli acidi grassi. Regolazione del metabolismo degli acidi grassi. Metabolismo dei fosfolipidi. Metabolismo del colesterolo e cenni sul metabolismo di altri composti steroidei.

#### *Metabolismo degli ammino acidi*

Deaminazione degli ammino acidi e ciclo dell'urea. Vie degradative di alcuni ammino acidi. Aspetti della biosintesi degli ammino acidi. Ammino acidi come precursori per alcune biosintesi. Ciclo dell'azoto e utilizzazione dell'ammoniaca.

#### *DNA e RNA*

Processi di replicazione e riparazione del DNA. Processi di trascrizione: sintesi del RNA messaggero. Meccanismi e regolazione della trascrizione. Processi post-trascrizionali, sintesi del rRNA e del tRNA.

#### *Sintesi e degradazione delle proteine*

L'organizzazione del genoma eucariotico. Il codice genetico. Il processo di traduzione. Meccanismi di inibizione e di regolazione del processo di traduzione. Modificazioni post-traduzionali. La degradazione programmata delle proteine.

#### *Espressione genica*

Alcuni aspetti dei meccanismi di regolazione dell'espressione genica nei procari ed eucarioti.

#### *Tesi consigliati:*

- L. Stryer, *Biochimica*, 3<sup>a</sup> Ed., 1989, Zanichelli, Bologna.  
J.D. Rawn, *Biochimica*, 1<sup>a</sup> Ed., 1990, McGraw-Hill Libri Italia, Milano.  
C.K. Mathews, K.E. Van Holde, *Biochemistry*, 1990, The Benjamin/Cummings Publishing Co., Redwood City.  
D. Voet, J.G. Voet, *Biochemistry*, 1990, John Wiley & Sons, New York.

## VECCHIO ORDINAMENTO

### 17. CHIMICA ANALITICA

PROF. RENATO UGO

#### *Programma delle lezioni*

- 1) La strumentazione in chimica analitica: una introduzione generale.
- 2) Introduzione alla spettroscopia atomica e molecolare e alle tecniche spettroscopiche.  
La natura dell'energia raggiante, la quantizzazione dell'energia, interazione radiazione materia, i differenti tipi di spettroscopia.  
Le soluzioni strumentali: sorgenti di radiazione, selezione di lunghezze d'onca, la rivelazione e determinazione della energia raggiante.  
Cenni ai dettagli di costruzione di spettrofotometri e spettrografi, la strumentazione i.r e visibile-ultravioletta, le leggi dell'assorbimento.
- 3) La spettroscopia infrarossa.  
La teoria elementare delle vibrazioni molecolari: cenni alla anarmonicità ed agli spettri rotovibrazionali.  
Gli spettri infrarossi di molecole poliatomiche ed i gruppi funzionali. Cenni ed affetti elettronici, di stato fisico, di solvente. Analisi quali e quantitative.  
Esercitazioni di interpretazione di spettri infrarossi pari a circa 10 ore.
- 4) La spettroscopia visibile-ultravioletta.  
Introduzione ai fondamenti della spettroscopia molecolare elettronica. Gli spettri elettronici e le transizioni elettroniche più comuni.  
Studio dei cromofori semplici: butadienico, benzenico, etc.  
Applicazioni analitiche quali e quantitative.  
Esercitazioni di lettura ed interpretazione di spettri elettronici di circa 10 ore.
- 5) La spettroscopia di risonanza magnetica nucleare.  
Le proprietà magnetiche dei nuclei.  
L'interpretazione classica e quantomeccanica del fenomeno di risonanza magnetica nucleare.  
La strumentazione. Cenni ai fenomeni di rilassamento nucleari e loro relazioni con intensità e larghezza di una banda.  
Il Chemical Shift: parte isotropica ed anisotropica.  
L'accoppiamento spin-spin di primo ordine e cenni all'ordine superiore.  
Costante di accoppiamento e suo significato chimico.  
Applicazioni analitiche quali e quantitative.  
Esercitazioni ed interpretazione di spettri N.M.R. pari a circa 10 ore.
- 6) Introduzione alla spettrometria di massa.  
Il principio fisico.  
La strumentazione in dettaglio.  
Introduzione ai concetti elementari della frammentazione molecolare.

La determinazione del peso molecolare e della formula bruta.  
Applicazioni: analitiche quali e quantitative.

7) Cenni sui metodi di rilassamento, diffusione e rifrazione.  
I meccanismi di rilassamento.

La spettroscopia Raman.

Fluorescente molecolare, atomica e dei raggi X.

8) Cenni sulle spettroscopie con radiazioni ad alta energia.  
Raggi X: diffrazione ed assorbimento.

La spettroscopia di elettroni: PES, AUGER e ESCA.

Analisi strutturale mediante l'uso combinato delle tecniche spettroscopiche IR, UV, NMR e MS.

#### *Testo consigliato:*

R. Ugo, *Analisi Chimica Strumentale*, L'Editrice Scientifica, L.G. Guadagni.

### 18. ESERCITAZIONI DI ANALISI CHIMICA QUANTITATIVA

PROF. PIERCARLO FANTUCCI

Il corso di Esercitazioni di Analisi Chimica Quantitativa si articola in due sezioni, sviluppate contemporaneamente, riguardanti principi e metodologie dell'analisi quantitativa gravimetrica e volumetrica, e principi e metodologie dell'analisi quantitativa strumentale.

Trattandosi di un corso di esercitazioni, queste ne costituiscono la parte preponderante. Le esercitazioni comprendono quelle eseguite in laboratorio e quelle a carattere istituzionale (a complemento delle lezioni).

Le esercitazioni di laboratorio sono articolate in due fasi:

- a) *esercitazioni individuali* aventi per tema alcuni tra i procedimenti più elementari dell'analisi quantitativa;
- b) *esercitazioni a gruppi* riguardanti metodologie di analisi specifiche comprensive di varie tecniche di laboratorio. Queste analisi, i cui temi verranno suggeriti dal docente, hanno lo scopo di caratterizzare differenti metodi di analisi specifici dell'industria.

Gli studenti prenderanno in visione i temi con ragionevole anticipo in modo da rendere programmabile l'esecuzione di tali esperienze a gruppi.

#### *Schema dettagliato degli argomenti trattati nel corso di Esercitazioni di Analisi Chimica Quantitativa*

- 1) *introduzione all'analisi quantitativa*: a) metodi chimici; b) metodi fisici e chimico fisici.
- 2) *Operazioni principali dell'analisi quantitativa*: a) prelievo del campione; b) attacco e dissoluzione del campione; c) separazione del costituente da dosare; d) misura, calcolo, interpretazione dei dati, valutazione degli errori.

- 3) *Analisi gravimetrica*: a) precipitazione; b) filtrazione e lavaggio dei precipitati; c) essiccamento calcinazione e pesata; d) esempi di analisi gravimetrica.
- 4) *Analisi volumetrica*: a) soluzioni standard; b) indicatori; c) curve di titolazione; d) titolazione diretta e inversa; e) calcoli e valutazione degli errori.
- 5) *Analisi volumetrica per neutralizzazione*: a) equilibrio acido base; b) teoria di Brönsted; c) titolazione in ambiente acquoso; d) forze di acidi e basi, pH in soluzione acquosa; e) curve di titolazione di acidi diversi con basi forti; f) indicatori; g) titolazione per neutralizzare in solventi non acquosi.
- 6) *Analisi volumetrica per precipitazione*: a) curve di titolazione; b) titolazione degli alogenuri secondo Volhard, Mohor, Fajans.
- 7) *Analisi volumetrica per ossidoriduzione*: a) potenziale di ossido-riduzione; b) curve di titolazione: punto finale; c) soluzioni standard riducenti ed ossidanti; d) iodometria e iodimetria; e) esempi di titolazione per ossidoriduzione.
- 8) *Analisi volumetrica per formazione di complessi*: a) reazioni di formazione di complessi. Costanti di instabilità; b) l'acido etilendiamminotetracetico ed il suo impiego; c) titolazione complessometriche; d) selettività delle reazioni complessometriche.
- 9) *Metodi spettroscopici*: a) assorbimenti: spettrofotometria di assorbimento i.r. visibile u.v., spettroscopia atomica di assorbimento, assorbimento di raggi X; b) Fotoluminescenza: diffusione di Rayleigh e di Mie (nefelometria e turbidimetria), fluorescenza, effetto Raman; c) Emissioni: spettroscopia atomica di emissione; d) Variazione delle caratteristiche di un raggio luminoso: rifrattometria, polarimetria.
- 10) *Metodi elettroanalitici*: a) potenziometria: acido-base, di precipitazione e formazione di complessi, di ossidoriduzione, con elettrodi ionosensibili; b) conduttimetria: acido-base, di precipitazione; c) polarografia.
- 11) *Metodi termometrici*: a) termogravimetria; b) analisi termica differenziale.
- 12) *Metodi cromatografici*: a) cromatografia su colonna; b) cromatografia su carta e strato sottile; c) cromatografia di scambio ionico; d) cromatografia in fase gassosa.

#### Valutazione finale

Il giudizio finale sull'attività dello studente si vale degli elementi emersi da tre prove: prova scritta, prova di laboratorio e prova orale.

La prova scritta è articolata in compiti svolti durante l'A.A. e sottopone allo studente un problema di analisi quantitativa, allo scopo di valutarne la conoscenza dei principi dei metodi e la capacità di rilevamento ed elaborazione dei dati sperimentali.

La prova di laboratorio si avvarrà dei risultati delle esercitazioni svolte durante l'anno.

Per i diplomati degli Istituti Tecnici Industriali ad indirizzo chimico la frequenza al Laboratorio è facoltativa e può essere sostituita da una prova pratica che verifichi la capacità degli studenti a padroneggiare le tecniche analitiche usate durante il corso di Esercitazioni.

La prova orale consiste in una discussione sui metodi generali della chimica ana-

litica quantitativa, fermo restando che i concetti propedeutici della chimica analitica si intendono noti.

Qualora lo studente non intenda avvalersi delle prove svolte durante l'anno gli è possibile sostenere le prove finali d'esame.

#### Tesi consigliati:

Treadwell, *Chimica Analitica (Analisi Quantitativa)*, Ed. Vallardi.

Catelani, Corbella; *Principi di Chimica Analitica Quantitativa*, Ed. Guadagni.

Malatesta, Araneo, *Chimica Analitica Quantitativa*, Ed. Vallardi.

D.A. Skoog, D.M. West, *Principles of Instrumental Analysis*, Ed. Holt, Rinehart-Winston, 1971.

Kolthoff, Sandell, Meehan, Bruckenstein, *Analisi Chimica Quantitativa*, Ed. Piccin.

R. Ugo, *Analisi Chimica strumentale*, Ed. Guadagni.

Hamilton, Simpson, Ellis, *Calcoli stechiometrici e problemi di Chimica Analitica*, Ed. Piccin.

A.I. Vogel a *Textbook of Quantitative Inorganic Analysis*, Ed. Longmans, 1968.

R. Morassi, G.P. Speroni, *Tecniche sperimentali moderne del laboratorio chimico*, Ed. Scuola Universitaria, Firenze.

## 19. CHIMICA ORGANICA II

PROF. STEFANO MAIORANA

### Sistemi aromatici carbociclici

- 1 - Considerazioni generali sui composti aromatici
- 2 - Proprietà chimico-fisiche dei sistemi aromatici
- 3 - Elementi della teoria degli orbitali molecolari
- 4 - Significati dell'energia di risonanza
- 5 - Aromaticità dei sistemi non benzenoidi. Regola di Huckel

### Reazioni dei sistemi aromatici benzenoidi

- 1 - Sostituzioni elettrofile sull'anello benzenico
- 2 - Sostituzioni nucleofile aromatiche
- 3 - Sostituzioni elettrofile e nucleofile sull'anello del naftalene
- 4 - Sostituzioni radicaliche
- 5 - Correlazioni quantitative tra struttura e reattività

### Areni

- Proprietà fisiche, fonti industriali
- Metodi di ottenimento e comportamento chimico

### *Alogenoderivati*

- 1 - Proprietà fisiche e comportamento chimico
- 2 - Metodi di preparazione
- 3 - Alogenuri arilici di particolare interesse

### *Alogenuri arilalifatici*

- 1 - Comportamento chimico e metodi di preparazione

### *Nitroderivati aromatici*

- 1 - Proprietà fisiche e comportamento chimico
- 2 - Metodi di preparazione
- 3 - Nitroderivati aromatici di particolare interesse

### *Ammine aromatiche*

- 1 - Proprietà fisiche, basicità e comportamento chimico
- 2 - Metodi di preparazione
- 3 - Ammine aromatiche di particolare interesse
- 4 - Ammine arilalifatiche

### *Diazocomposti aromatici, sali di diazonio e loro derivati*

- 1 - Metodi di ottenimento dei sali di diazonio
- 2 - Strutturali dei sali di diazonio
- 3 - Comportamento chimico dei sali di diazonio
- 4 - Reazione di arilazione
- 5 - Riduzione

### *Derivati aromatici con funzioni nitroso-, idrossilammino-, iarazo-, azo-, azosi*

#### **Fenoli**

- 1 - Proprietà fisiche, acidità e comportamento chimico
- 2 - Metodi di preparazione
- 3 - Fenoli di particolare interesse

### *Aldeidi aromatiche*

- 1 - Proprietà fisiche e comportamento chimico
- 2 - Metodi di preparazione

- 3 - Aldeidi aromatiche di particolare interesse

### *Chetoni aromatici*

- 1 - Proprietà fisiche e comportamento chimico
- 2 - Metodi di preparazione
- 3 - Chetoni aromatici di particolare interesse

### *Acidi arilcarbossilici*

- 1 - Acidi arilcarbossilici
- 2 - Acidi arilalifatici

### *Chinoni*

- 1 - Proprietà chimico-fisiche e comportamento chimico
- 2 - Metodi di preparazione
- 3 - Chinoni di particolare interesse

### *Acidi arilsolfonici*

*Acidi solfinici, acidi solfenici, tiofenoli, solfuri, solfossidi e solfoni*

## **PARTE ETEROCICLICA**

### **GENERALITÀ, CLASSIFICAZIONI, NOMENCLATURA**

#### *Eteroaromaticità*

- 1 - Estensione di concetto di aromaticità agli eterocicli
- 2 - Densità elettronica e ordine di legame
- 3 - Densità di carica e ordine e di legame
- 4 - Energia di localizzazione

#### *Basicità, acidità e tautomeria nei sistemi eterociclici azotati*

- 1 - Sistemi eterociclici con carenza elettronica
- 2 - Sistemi eterociclici con eccedenza elettronica

#### *Comportamento chimico e reattività nei sistemi eterociclici*

- 1 - Sostituzioni elettrofile
- 2 - Sostituzioni nucleofile

### 3 - Reazioni specifiche di gruppi funzionali nella serie eterociclica

*Considerazioni generali sul modo di formazione dei sistemi eterociclici*

*Reazioni di apertura dagli anelli eterociclici*

*Azine: piridina e benzoderivati. Diazine*

*Anelli eterociclici a 5 atomi contenenti un eteroatomo:*

*pirrolo e benzoderivati. Furano e benzoderivati. Topfene e tionafene.*

*Anelli eterociclici a 6 atomi contenenti due eteroatomi:*

*Imidazolo. Pirazolo. Isossazolo. Tiazolo e benzotiazolo.*

*Testi consigliati:*

*Chimica Organica*, Fusco, Rosnati, Bianchetti, Ed. Guadagni, volume secondo.  
*Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure*, Jerry March, Ed. McGraw-Hill Book Company.

*Chimica Organica Contemporanea*, Francesco Naso, Ed. Ambrosiana.  
*Introduzione alla Chimica Organica*, Streitwieser, Heathcock, Ed. Piccin Editore.

*Principi di Chimica Eterociclica*, Katritzky, Lagowski, Ed. Ambrosiana.

*Introduction to Molecular-Orbital Theory*, Arnó Liberles, Ed. Holt, Rinehart and Wilson, Inc.

## 20. COMPLEMENTI DI CHIMICA ORGANICA

PROF. FRANCESCA PELIZZONI

*Elementi di spettroscopia*. Spettri di assorbimento, spettroscopia UV-Visibile, spettroscopia IR, spettroscopia NMR, cenni alla spettrometria di massa.

*Stereochimica dei sistemi ciclici*. Nomenclatura, analisi conformazionale degli anelli a 3, 4, 5 e 6 atomi, sistemi ad anelli condensati, relazione fra struttura degli anelli e reattività.

*Amminoacidi - Peptidi - Proteine*: Generalità, applicazioni, nomenclatura, steo-chimica e proprietà acido-base degli amminoacidi. Sintesi classiche, produzione industriale, risoluzione ottica, sintesi asimmetrica degli amminoacidi. Reattività chimica degli amminoacidi, formazione dei peptidi mediante reazioni classiche ed in fase solida, peptidi naturali, cenni sulla struttura delle proteine.

*Carboidrati*: Monosaccaridi: classificazione, nomenclatura, rappresentazione steriche, strutture e proprietà, C,N,O-Glicosidi: ruolo biologico e interesse industriale.

Oligo- e polisaccaridi: principali strutture, cenni alla tecnologia dello zucchero e della cellulosa.

*Composti carbociclici*: Generalità sulla formazione dei cicli. Sintesi, proprietà e derivati principali dei composti ciclorpanici, ciclobutanici, ciclopentanici, cicloesani e macrociclici.

*Grassi - saponi - detergenti*: Generalità dei grassi naturali, grassi alimentari, oli siccativi. Saponi e detergenti sintetici. Cenni alla biosintesi degli acidi grassi e della acetogenine.

*Terpenoidi*: Origine, biosintesi e descrittiva dei mono-, sesqui-, di-, sester-, tri-, tetraterpenoidi di maggior interesse biologico o industriale.

*Steroidi*: Struttura generale, analisi conformazionale, origine biogenetica. Cassi di steroidi naturali: steroli, vitamine D, glicosidi cardiaci, saponine, ecdisoni, acidi biliari, corticosteroidi, gestogeni, androgeni, estrogeni. Principali processi industriali di semisintesi di steroidi.

*Introduzione alla strategia di sintesi*. Trasformazioni di gruppi funzionali. Reazioni di allungamento e accorciamento di catene. Gruppi protettivi. Percezione di legami strategici.

Cenni alla progettazione delle sintesi mediante calcolatore.

*Testi consigliati:*

Si faccia riferimento ai corsi di "CHIMICA ORGANICA I e II".

## 21. ESERCITAZIONI DI CHIMICA INDUSTRIALE II

PROF.SSA RITA ANNUNZIATA E DR. PIERO SOZZANI

Il corso si prefigge i seguenti obiettivi:

- 1) Apprendimento da parte dello studente delle principali operazioni del laboratorio di Chimica Organica.
- 2) Verifica sperimentale da parte dello studente di quanto appreso in via teorica nei corsi di Chimica Organica I e II.

3) Acquisizione da parte dello studente delle basi teoriche e delle capacità sperimentali necessarie a condurre correttamente reazioni organiche semplici e a riconoscerne i prodotti.

Gli scopi proposti si realizzano rispettivamente attraverso tre distinte fasi di lavoro:

1) Esecuzione da parte dello studente delle operazioni fondamentali del laboratorio di Chimica Organica quali la cristallizzazione, la distillazione (a pressione atmosferica, ridotta e in corrente di vapore), l'estrazione con solventi, la purificazione di composti organici e la determinazione della loro purezza, utilizzando tecniche cromatografiche quali la cromatografia su strato sottile e la gascromatografia.

2) Esecuzione da parte dello studente di alcune delle più comuni reazioni ricorrenti nelle sintesi organiche: reazioni di sostituzione elettrofila su substrati aromatici (Friedel-Crafts, nitratura, alogenazione, solfonazione); reazioni di sostituzione nucleofila su carbonio saturo (confronto della reattività di substrati che reagiscono tramite meccanismi  $S_N1$  e  $S_N2$ ); reazioni di sostituzione nucleofila su substrati aromatici (reazioni su alogeno-areni attivati; sostituzione del diazogrupo); reazioni di ossidazione (cromica, nitrica); reazioni di riduzione di sostanze ossigenate o azotate (con idruri e altri riducenti inorganici quali il  $FeSO_4$  in ambiente alcalino o metalli in ambiente acido); reazioni coinvolgenti carbanioni (condensazione di Claisen, reazioni di composti di Grignard); reazioni di diazocopolazione; reazioni in condizioni di trasferimento di fase (alchilazione di un gruppo metilenico attivo).

Vengono sintetizzati alcuni polimeri di interesse industriale (poliammidi, polimetacrilato, polistirene ecc.) e vengono studiati e discussi i metodi di sintesi le proprietà in soluzione ed allo stato solido.

Vengono illustrati i metodi per la determinazione della stabilità termica dei prodotti.

In tutte le preparazioni svolte viene dato particolare rilievo ai problemi relativi alla sicurezza e allo smaltimento o al recupero dei sottoprodotti delle reazioni.

3) Riconoscimento di sostanze organiche tramite reazioni semplici e studio della loro reattività chimica.

Sono programmate visite a impianti di produzione di intermedi organici su media scala, e seminari sui problemi connessi con l'attività del chimico organico.

La durata del corso è orientativamente compresa tra i 45-50 pomeriggi (4 ore) includendo in tal tempo sia le lezioni teoriche sia le esercitazioni di laboratorio.

*Testo consigliato:*

I. Vogel, Chimica Organica Pratica, Casa Editrice Ambrosiana - Milano.

## 22. CHIMICA FISICA I

PROF. PAOLO CARNITI

*Primo e secondo principio della termodinamica*

Sistemi termodinamici. Variabili termodinamiche. Temperatura. Lavoro. Energia interna e primo principio della termodinamica. Calore. Formulazione del

primo principio per un processo infinitesimo. Processi naturali e reversibili. Secondo principio della termodinamica. Entropia. Equazione fondamentale per un sistema chiuso. Processi spontanei come processi di mescolamento. Interpretazione dell'entropia a livello molecolare.

*Funzioni ausiliarie e condizioni di equilibrio*

Le funzioni  $I$ ,  $A$  e  $G$ . Proprietà dell'entalpia. Proprietà dell'energia libera di Helmholtz. Proprietà dell'energia libera di Gibbs. Equazioni fondamentali per un sistema chiuso in funzione di  $H$ ,  $A$  e  $G$ . Potenziale chimico. Criteri di equilibrio in funzione di proprietà estensive. Criteri di equilibrio in funzione di proprietà intensive. Relazioni matematiche fra le varie funzioni di stato. Grandezze termodinamiche misurabili. Calcolo delle variazioni delle funzioni termodinamiche entro intervalli finiti di temperatura e di pressione. Grandezze molari e grandezze parziali molari. Calcolo delle grandezze parziali molari da dati sperimentali.

*Termodinamica dei gas*

Gas perfetto. Miscela gassosa perfetta. Gas reali. Equazioni di stato per i gas reali. Equazioni di Van der Waals. Equazione dei viriali. Principio degli stati corrispondenti. Fattore di compressibilità. Effetto Joule-Thomson. Fugacità di un gas reale puro. Fugacità in una miscela di gas reali. Regola di Lewis e Randall.

*Equilibrio di reazione in fase gassosa*

Stechiometria delle reazioni chimiche. Costante di equilibrio per una reazione in fase gassosa. Dipendenza della costante di equilibrio dalla temperatura. Energie libere ed entalpie di formazione dagli elementi. Determinazione delle entalpie di formazione. Calori di combustione. Numero delle reazioni indipendenti. Condizioni di equilibrio per più reazioni indipendenti.

*Regola delle fasi*

La regola delle fasi per componenti che non reagiscono. La regola delle fasi per componenti che reagiscono. Vincoli addizionali. Diagrammi di stato. Esempi di applicazione della regola delle fasi.

*Equilibri di fase nei sistemi a un componente*

Equazione di Clausius-Clapeyron. Integrazione dell'equazione di Clausius-Clapeyron. Effetto di un secondo gas sulla tensione di vapore di un liquido o di un solido.

*Proprietà generali delle soluzioni e equazioni di Gibbs-Duhem*

Equazione di Gibbs-Duhem. Relazioni fra pressione e temperatura. Relazione tra tensione di vapore parziale e composizione. Curve empiriche di tensione di vapore parziale per soluzioni binarie. Equazione di Gibbs-Duhem in relazione alle leggi di Raoult e di Henry.

*Soluzioni ideali*

Definizione di soluzione ideale. Leggi di Raoult e di Henry. Fase vapore imperfetta. Proprietà di mescolamento delle soluzioni ideali. Dipendenza degli equili-

bri liquido-vapore dalla temperatura e dalla pressione. Legge di Nernst. Equilibrio fra una soluzione ideale e un solido puro. Abbassamento crioscopico e innalzamento ebullioscopico. Solubilità ideale dei gas e dei solidi nei liquidi.

#### *Soluzioni non ideali*

Coefficienti di attività. Convenzioni per i coefficienti di attività nella scala delle frazioni molari. Il coefficiente di attività in relazione alle leggi di Raoult e di Henry. Uso delle scale della molalità e della molarità. Convenzione per i coefficienti di attività nella scala della molalità. Effetto della temperatura e della pressione sui coefficienti di attività. Determinazione dei coefficienti di attività. L'equazione di Gibbs-Duhem per i coefficienti di attività. Funzioni d'eccesso. Equazioni di Van Laar, di Margules, di Redlich e Kister, di Wohl. Energia libera di eccesso e miscibilità parziale.

#### *Equilibri di reazione in soluzione*

Energia libera di formazione in soluzione. Costanti di equilibrio in soluzione. Loro dipendenza dalla temperatura e dalla pressione. Rapporto tra le costanti di equilibrio in fase gassosa e in soluzione.

#### *Terzo principio della termodinamica*

Formulazione del terzo principio. Verifiche e applicazioni.

#### *Testi di consultazione:*

K. Denbigh, I principi dell'equilibrio chimico, Casa Editrice Ambrosiana, Milano, 1971.  
O.A. Hougen, K.M. Watson, R.A. Ragatz, *Chemical Process Principles, Part II, Thermodynamics*, J. Wiley, New York, 1959.  
J.M. Prausnitz, *Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1969.

### **23. ESERCITAZIONE DI CHIMICA FISICA I**

PROF. CLAUDIO MARIA MARI

A) Introduzione al linguaggio Basic con cenni di programmazione.  
B) Termodinamica:

Gas ideali e reali

Primo, secondo e terzo principio della termodinamica

Entalpia

Entropia

Energia libera

Equilibri di fase

Equilibri chimici

Soluzioni non elettrolitiche

C) Stima delle proprietà fisiche e termodinamiche dei fluidi.

#### *Testi consigliati:*

M.G. Bettoli, M. Mastragostino, *Problemi di termodinamica con risoluzione*, Ed. Corso, Bologna, 1970.  
J. Bares et al., *Collection of problems in Physical Chemistry*, Ed. Pergamon Press, 1961.  
R.C. Reid, J.M. Prausnitz, T.K. Sherwood, *The properties of gases and liquids*, III ed., Mc Graw-Hill, New York, 1977.

### **24. MINERALOGIA CON ESERCITAZIONI PRATICHE**

PROF. Fagnani Gustavo (CORSO LIBERO PAREGGIATO)

#### *Introduzione*

La mineralogia e le sue parti. Rapporti con la chimica.

#### *Stato solido*

Sostanze amorfe e cristalline. Nucleazione e crescita dei cristalli. Periodicità dell'edificio cristallino.

#### *Disposizioni periodiche*

Disegni ornamentali periodici uni- e bidimensionali. Reticolo tridimensionale. Reticolo reciproco. Elementi di simmetria. Gruppi puntuali. Reticoli di Bravais. Gruppi spaziali.

#### *Cristallografia morfologica*

Leggi fondamentali. Simboli di facce, spigoli, forme. Calcoli e sistemi cristallini. Loro descrizione. Studio morfologico dei cristalli. Associazioni di cristalli.

#### *Cristallografia a raggi x*

Equazioni di Laue e di Bragg. Sfera di Ewald. Diffrazione da polvere: camere Straumanis e Guinier, diffrattometro. Diffrazione da cristallo singolo: camera per cristallo rotante-oscillante, camere Weissenberg e Buerger, diffrattometro. Determinazione delle costanti reticolari e del gruppo spaziale. Schema per la determinazione delle strutture.

#### *Cristallochimica*

Legami chimici. Raggi ionici e atomici. Numero di coordinazione. Regole di Pauling. Tipi di soluzioni solide. Formule cristallografiche. Trasformazioni di fase. Tipi di trasformazioni polimorfe. Esempi di strutture.

#### *Proprietà fisiche*

Proprietà non direzionali, direzionali continue e discontinue. Descrizione mediante scalari, vettori, tensori.



### *Ottica cristallografica*

Propagazione della luce nei cristalli. Indicatrici ottiche. Dispositivi polarizzanti. Microscopio da mineralogia. Osservazioni in luce parallela con il solo polarizzatore e a nicol incrociati. Osservazioni in luce convergente. Polarizzazione rotatoria. Indici di rifrazione. Controlli strutturali sulle proprietà ottiche. Tavolino universale. Microscopico da mineralogia.

### *Ambiente chimico terrestre*

Distribuzione geochimica degli elementi. Minerogenesi e petrogenesi. Giacimenti minerali. Giacimenti di carboni e di idrocarburi. Processi industriali di arricchimento dei minerali utili. Produzione e riserve italiane e mondiali.

### *Mineralogia descrittiva*

Criteri di classificazione. Elementi nativi. Solfuri. Alogenuri. Ossidi e idrossidi. Nitrati, carbonati e borati. Solfati, cromati, molibdati e wolframati. Fosfati, arseniati e vanadati. Silicati: nesosilicati, subnesosilicati, sorosilicati, ciclosilicati, inosilicati, fillosilicati, tectosilicati. Composti organici.

### *Esercitazioni*

Il corso teorico è integrato da esercitazioni pratiche di cristallografia morfologica e strutturale, di ottica cristallografica e di mineralogia descrittiva con elementi di petrografia e di giacimenti minerali.

### *Testi consigliati:*

#### *Appunti di lezioni*

A. Bianchi, G. Schiavinato, *Corso di Mineralogia*. (Per allievi dei corsi di laurea in chimica e chimica industriale) XII Ed. Cedam, Padova, 1970.  
G. Carobbi, *Trattato di Mineralogia*. Vol. I e II USES, Firenze, 1971.

Programma svolto nell'a.a. 89/90.

## **25. CHIMICA FISICA INDUSTRIALE**

PROF. LUCIO FORNI

### *a) FENOMENI DI TRASPORTO E APPLICAZIONI*

#### *Introduzione*

Scopo del Corso e sue correlazioni con gli altri Corsi tecnologici (Impianti Industriali Chimici I e II).

#### *I fenomeni di trasporto*

Trasporto molecolare e diffusione. Forze intermolecolari. Teoria cinetica dei processi di trasporto nei gas. Processi di trasporto nei liquidi.

### *Trasferimento di quantità di moto*

Proprietà fisiche dei fluidi e loro misura. Processi fluenti stazionari. Equazione del bilancio energetico. Equazioni del moto dei fluidi, di continuità, di Navier-Stokes, di Eulero, di Bernoulli. Dissipazione dell'energia. Moto dei fluidi nei condotti, equazione del bilancio meccanico; analisi dimensionale, resistenza al moto, equazione di Fanning. Moto laminare. Moto turbolento. Misure relative al moto dei fluidi. Ugelli. Moto isoterma di gas viscoso. Moto dei fluidi attraverso masse porose, equazioni di Blake-Kozeny, di Burke-Plummer, di Ergun. Filtrazione. Moto di solidi attraverso fluidi. Classificazione idraulica. Fluidizzazione. Pompe per industria chimica. Compressione dei gas. Compressori.

### *Trasferimento di calore*

Conduzione stazionaria. Conduzione non stazionaria. Trasmissione di calore nei fluidi, coefficienti limitari e loro valutazione. Scambiatori di calore. Evaporazione, evaporatori. Proprietà termodinamiche del vapor d'acqua. Irraggiamento. Trasmissione di energia radiante fra varie superfici, irraggiamento di gas e vapori.

### *Trasferimento di massa*

Diffusione, leggi di Fick. Equazione di continuità. Diffusione stazionaria. Diffusione non stazionaria. Coefficienti di trasferimento di massa e loro determinazione.

Trasferimento simultaneo di massa e calore. Trasferimento di massa tra due fasi fluide a contatto, teoria del doppio film, della penetrazione, del film-penetrazione. Trasferimento di massa con reazioni chimiche. Trasferimento di massa e calore all'interno di masse solide porose. Psicrometria, misure di umidità. Condizionamento dell'aria. Raffreddamento dell'acqua.

### *b) CATALISI, ASPETTI APPLICATIVI*

Definizioni. Adsorbimento. Cinetica delle reazioni catalitiche. Preparazione e caratterizzazione di un catalizzatore. Regimi di reazione e limitazioni diffusive. Reattori da laboratorio e loro accessori.

### **Nota**

Le lezioni teoriche sono alternate ad esercitazioni numeriche. L'esame di profitto consiste in uno scritto, costituito da problemi inerenti gli argomenti trattati, seguito da un orale.

#### *Elenco libri consigliati:*

L. Forni, *Fenomeni di Trasporto*, Cortina, Milano, 1979.  
L. Forni, *Introduzione alla catalisi*, CUSL, Milano, 1982.  
R.B. Bird, W.E. Stewart, E.N. Lightfoot, *Transport Phenomena*, Wiley, London, 1960.  
C.O. Bennett, J.E. Meyers, *Momentum, heat and mass transfer*, McGraw-Hill, New York, 1962.

C.N. Satterfield, *Heterogeneous Catalysis in practice*, McGraw-Hill, New York, 1980.

J.R. Anderson, K.C. Pratt, *Introduction to Characterization and Testing of Catalysts*, Academic Press, New York, 1985.

J.T. Richardson, *Principles of Catalyst Development*, Plenum Press, New York, 1989.

## 26. CHIMICA FISICA II

PROF. GIORGIO FAVINI

### 1) *Teoria quantistica: tecniche ed applicazioni*

*Il moto traslazionale.* La particella nella buca; proprietà delle soluzioni; il moto nelle due dimensioni; l'attraversamento della barriera.

*Il moto vibrazionale.* La soluzione formale del problema; i livelli energetici; le funzioni d'onda; le proprietà delle soluzioni.

*Il moto rotazionale.* La rotazione nelle due dimensioni; la soluzione formale del problema; la quantizzazione della rotazione; la rotazione nelle tre dimensioni; la soluzione formale; le proprietà delle soluzioni; la quantizzazione nello spazio; lo spin; il modello vettoriale.

### 2) *Termodinamica statistica: tecniche ed applicazioni*

*Meccanica statistica di particelle distinguibili.* Le probabilità; la distribuzione di Boltzmann; modificazioni richieste dalla cegenerazione; la funzione di ripartizione delle particelle.

*L'aspetto statistico dell'entropia.* L'equazione di Boltzmann-Planck; la dipendenza del numero di complessioni dall'energia e dal volume.

*Funzioni termodinamiche per sistemi localizzati.* La legge di distribuzione; il modello di Einstein; il modello di Debye; i cristalli atomici.

*Sistemi di particelle non localizzate (indistinguibili).* La legge di distribuzione; il meccanismo della rotazione; la funzione di ripartizione rotazionale per le molecole lineari; la funzione di ripartizione per le molecole non lineari; la funzione di ripartizione vibrazionale; le energie di riferimento; la funzione di ripartizione elettronica; l'entropia residua, la funzione di ripartizione nucleare; orto e para  $H_2$  e  $D_2$ ; le rotazioni interne; le funzioni di energia libera; la tabulazione dei dati di termodinamica statistica.

*L'equilibrio chimico per i gas ideali.* Determinazione delle costanti; interpretazione statistica delle costanti di equilibrio; di scambio isotopico; valutazione della posizione dell'equilibrio.

### 3) *Proprietà elettriche e magnetiche delle molecole*

Momento elettrico dipolare; polarizzabilità ed indice di rifrazione; attività ottica; proprietà additive.

Forze intermolecolari e loro ruolo nei reticoli ionici, nei raggi molecolari, nei gas e nei liquidi.

Suscettività magnetica e momenti magnetici.

*Testo di consultazione:*

P.W. Atkins, *Physical Chemistry (Third edition) Cap. 13-14-21-22-24. Edizione precedente anche in italiano.*

## 27. ESERCITAZIONI DI CHIMICA FISICA II

PROF. PIERLUIGI BELTRAME - PROF. GIORGIO FIORI

### *Cinetica chimica*

Velocità di reazione. Equazione cinetica. Costante di velocità. Ordine di reazione parziale e globale. Ordine apparente di reazione. Ordine e molecolarità di reazione. Equazioni cinetiche integrate: reazioni dirette del primo ordine, reazioni dirette del secondo ordine del tipo  $2A \rightarrow P$ ,  $A + B \rightarrow P$  ( $A^\circ = B^\circ$ ),  $A + B \rightarrow P$  ( $A^\circ \approx B^\circ$ ),  $aA + bB \rightarrow P$ , reazioni dirette di ordine 0,  $\frac{1}{2}$ , n.

Equazioni cinetiche integrate in funzione del grado di avanzamento della reazione. Tempo di dimezzamento.

Studi cinetici mediante misure di grandezze proporzionali alla concentrazione. Determinazione dell'ordine di reazione: metodo dell'integrazione, delle velocità iniziali e differenziale, dell'isolamento. Reazioni parallele. Reazioni opposte. Reazioni consecutive. Ipotesi dello stato intermedio stazionario.

Reazioni continue: reattore continuo tubolare, reattore a completo mescolamento. Tempo di residenza.

Dipendenza della costante di velocità di reazione dalla temperatura.

Equazione di Arrhenius. Fattore preesponenziale ed energia di attivazione. Teoria delle collisioni.

Equazione di Eyring. Entropia, entalpia ed energia libera di attivazione. Teoria dello stato di transizione.

Catalisi omogenea. Catalisi acido-basica. Cenni di catalisi eterogenea.

Catalisi enzimatica: campi ottimali di attività enzimatica, equazione di Michaelis-Menten,  $K_m$ ,  $V_{max}$ , derivazione dell'equazione di Michaelis-Menten secondo Briggs e Haldane, metodo di Lineweaver-Bunk per la determinazione dei parametri  $K_m$  e  $V_{max}$ , inibizione da substrato, inibizione da prodotti (competitiva, non competitiva e anicompetitiva).

### *Cinetica elettrochimica*

Reazioni di elettrodo e sistemi elettrochimici. Ripartizione della tensione in un sistema elettrochimico. Trasformazione di materia e circolazione di corrente elettrica. Stadi di una reazione di elettrodo. Elettrocatalisi.

Calcolo della velocità di uno stadio di trasferimento elettronico. Equazione di Butler-Volmer. Legge di Tafel.

Trasferimento di massa: diffusione, migrazione elettrica, convenzione. Calcolo della velocità di un processo diffusivo. Equazione di Fick. Voltammetria e polarografia. L'elettrodo a mercurio gocciolante. Il polarografo.

Equazione di Ilkovic. L'elettrodo a disco rotante. Equazione di Levich.

### *Esperimenti pratici*

Idrolisi acida ed enzimatica del saccarosio (polarimetria).  
Reazioni di esterificazione organica (nmr).  
Alogenazione di composti carbonilici ed equilibri chetoenolici (spettrofotometria).  
Idrolisi di esteri in ambiente alcalino (conduttimetria) ed acido (titolazione diretta).  
Determinazione polarografica dello stadio cineticamente determinante di una reazione di elettrodo e di grandezze termodinamiche (potenziale standard, struttura e costante di stabilità di complessi di ioni metallici).  
Determinazione della velocità di trasferimento elettronico in una reazione con controllo cinetico misto (elettrodo a disco rotante).

### *Testi di consultazione:*

P.W. Atkins, *Physical Chemistry*, Oxford University Press, Oxford (1986).  
G.M. Barrow, *Chimica Fisica*, Zanichelli, Bologna (1976).  
J.W. Moore, *Chimica Fisica*, Piccin, Padova (1979).  
J.W. Moore, R.G. Pearson, *Kinetics and Mechanism*, Wiley, New York (1981).  
K.J. Laidler, P.S. Bunting, *The Chemical Kinetics of Enzyme Action*, Oxford University Press, Oxford (1973).  
L. Meites, *Polarographic Techniques*, Interscience, New York (1965).  
Southampton Electrochemistry Group, *Instrumental Methods in Electrochemistry*, E. Horwood, New York (1985).

## **28. IMPIANTI INDUSTRIALI CHIMICI CON ELEMENTI DI DISEGNO I**

PROF. VITTORIO RAGAINI

### *Introduzione al corso*

Gli Impianti Chimici in generale. Impostazione del corso per i Chimici Industriali. Rapporto con corsi affini (Fisica Tecnica, Impianti 2).  
Il problema della reperibilità dei dati. Testi consigliati per il corso e per consultazione generale.

### *Termodinamica Applicata*

Equazione di Gibbs-Duhem. Criteri per l'equilibrio di sistemi a più fasi e più componenti. Tensione di vapore e calore di evaporazione; equazione relative. Calcolo della fugacità per un gas puro e in miscela. Equilibrio liquido-Vapore (ELV). Criteri di equilibrio in termini di fugacità. Variazione dei coefficienti di attività e fugacità con la temperatura. Fugacità di un liquido in equilibrio con un vapore. Relazioni di equilibrio. Tipi di diagrammi per l'ELV: sistemi binari e ternari. Metodi sperimentali per lo studio dell'ELV. Consistenza termodinamica locale e generale. Le funzioni di eccesso. Modelli generali per il calcolo dei

coefficienti di attività in fase liquida per soluzioni binarie e a più componenti (Wohl, Wilson, NRTL, UNIFAC). Previsione dell'ELV in condizioni reali per sistemi a più componenti; schemi a bocchi per i programmi automatici di calcolo. Valutazione dei parametri delle equazioni per il calcolo dei coefficienti di attività. Solubilità dei gas nei liquidi. Stabilità di una miscela liquida rispetto allo smiscelamento: curve binodali e spinodali. Termodinamica dell'equilibrio liquido-liquido (ELL). Diagrammi binari e ternari per l'ELL; tie-lines. Correlazione per la determinazione delle rette coniugate (tie-lines) e del plait point.

### *Assorbimento dei gas*

Introduzione. Bilancio materiale di una colonna di assorbimento (CA). Bilancio entalpico di una CA. Condizioni limite di assorbimento: assorbimento e desorbimento (stripping). Altezza del riempimento di una CA. L'unità di trasferimento di massa. Calcolo dei coefficienti di trasferimento di massa per colonna a riempimento. Colonne a piatti per l'assorbimento: calcolo del numero dei piatti. Efficienza dei piatti. Sezione di una colonna a piatti. Condizioni di ingorgo per torri a riempimento.

### *La distillazione*

Introduzione e definizioni. Distillazione continua ad uno stadio (flasch). Distillazione continua a stadi (rettifica). Bilancio materiale e termico di una colonna di rettifica. Calcolo del numero di stadi per una colonna di rettifica per sistemi a due componenti (metodi di Ponchon-Savarit e Mac-Cabe-Thiele; metodi analitici; correlazioni empiriche). Rapporto di riflusso; minimo, massimo, ottimo. Calcolo del colore da fornire in caldaia e da sottrarre nel condensatore in una colonna di rettifica. Condensazione parziale e totale. Distillazione di sistemi a più componenti: calcolo del numero di stadi per una colonna di rettifica (metodi dei componenti chiave; di Lewis-Matheson; della matrice tridiagonale). Efficienza dei piatti. Colonne di rettifica a riempimento. Distillazione estrattiva e azeotropica. Distillazione discontinua. Rettifica discontinua. Distillazione molecolare.

### *Estrazione liquido-liquido*

Introduzione. Predizione dell'equilibrio liquido-liquido e scelta del solvente. Operazioni estrattive. Cinetica del processo di trasferimento di massa tra le fasi liquide. Estrazione a stadi; metodi di calcolo: a) estrazione con solvente immiscibile (a singolo o a più stadi, in equi e in controcorrente); b) estrazione con solvente parzialmente miscibile (a singolo o a più stadi, in equi e controcorrente, a singola o doppia alimentazione). Efficienza degli stadi di estrazione. Estrazione a contatto continuo. Potenza degli agitatori.

## **29. CHIMICA INDUSTRIALE II (ORGANICA)**

PROF. FERNANDO MONTANARI

1) Situazione attuale dell'industria chimica italiana. Confronto con gli altri paesi industrializzati. Il futuro della chimica.

- 2) Fonti di energia e materie prime per l'industria chimica: carbone, gas naturale, petrolio.
- 3) Estrazione e lavorazione del petrolio.  
Cracking termico: meccanismo, processi. Visbreaking. Coking. Steamcracking. Produzione di olefine. Hydrocracking. Cracking catalitico (meccanismo, catalizzatori, processi). Reforming catalitico. Alchilazione. Polimerizzazione. Purificazione e desolfurazione degli idrocarburi. Hydrotreating
- 4) Gas di sintesi. Produzione di CO e di H<sub>2</sub>. Conversione a idrocarburi: processo SASOL Fischer-Trops, processo Mobil.
- 5) Unità C<sub>1</sub>: metanolo, formaldeide, ac. cianidrico.
- 6) Etilene. Propilene. Buteni. Butadiene. Isoprene. Ciclopentadiene. Olefine superiori. Processi di metatesi.
- 7) Acetilene: produzione, applicazioni. Confronto con la chimica dell'etilene.
- 8) Idroformilazione: meccanismo, catalizzatori, processi. Processi di carbonilazione e di carbossilazione.
- 9) Prodotti di ossidazione dell'etilene: ossido di etilene, glicole etilenico, polietilenglicoli, glicole carbonato. Dimetil carbonato. Acetaldeide: il processo Wacker-Hoechst; acetaldeide da etanolo e da alcani. Acido acetico da acetaldeide e da metanolo. Anidride acetica.
- 10) Etanolo. Isopropanolo. Butanoli. Alcoli superiori. Dioli e polioli. Alogenuri, esteri e eteri vinilici.
- 11) Intermedi per poliammidi. Ac. adipico. Esametilendiamina. Altri ac. dicarbossilici e diammine. Caprolattame. Lauril lattame.
- 12) Prodotti di ossidazione del propilene: ossido di propilene, acetone, acidi ed esteri acrilici e metacrilici. Processi di ammossidazione.
- 13) Sintesi industriali di ammino-acidi.
- 14) Idrocarburi fluo:urati. Processi industriali di fluorurazione.
- 15) Idrocarburi clorurati.
- 16) Idrocarburi aromatici. Produzione da carbone e da petrolio. Processi di dealchilazione, isomerizzazione, disproporzionamento. Benzene. Toluene. Xileni. Naftalene. Antracene.
- 17) Derivati del benzene. Etil benzene, stirene, cumene, alchil benzeni, cicloesano, fenolo, anidride maleica, diisocianati.
- 18) Derivati degli xileni e del naftalene: anidride ftalica, esteri ftalici, ac. tereftalico.
- 19) Derivati dell'antracene: antrachinone. Produzione di H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>.
- 20) Eterociclici aromatici di importanza industriale: piridine, triazine.

#### Testi consigliati:

K. Weissemel, H. Arpe, *Industrial Organic Chemistry*, Verlag Chemie, Weinheim 1978 (Ed. Italiana Piccin Editore Padova 1981); id. id., *Aggiornamento ricavato dalla III ed. originale* (Piccin, Padova 1991).  
H.G. Franck, J.W. Stadelhofer, *Industrial Aromatic Chemistry*, Springer-Verlag, Berlino, 1988.  
K.R. Payne, *Chemicals from Coal: New Processes*, Wiley, New York, 1987.  
C. Giavarini, A. Girelli, *Tecnologia del Petrolio, Petrolchimica*, Ed. Scientifiche Siderea, Roma, III Ed., 1985.

L. Berti, M. Calatozzolo, R. Di Bartolo, *Processi Petroliferi e Petrolchimici; Processi Di alchilazione, Nitrazione, Solfonazione, Alogenazione; processi di carbonilazione, Ossidazione, Idrogenazione, Idratazione*, Ed. D'Anna, Messina, Firenze, 1980.

## 30. ESERCITAZIONI DI CHIMICA INDUSTRIALE I

### PROF. GIUSEPPE DI SILVESTRO

#### OBIETTIVI DEL CORSO

Al termine del corso lo studente dovrebbe:

- valutare correttamente i parametri stechiometrici importanti di semplici processi industriali
- riconoscere gli stadi e le operazioni di processo in cui possano insorgere problemi di sicurezza o di instabilità
- usare le metodologie teoriche e sperimentali per determinare la stabilità dei prodotti chimici.

#### PROGRAMMA DEL CORSO

##### A) *Analisi tecnica di un processo*

Stechiometria industriale - reagenti limitanti - resa, selettività e conversione. Bilancio di materia totale e per passaggio. Criteri alternativi per impostare il bilancio di materia; individuazione dei componenti chiave. Calcolo del riciclo e dello spurgo. Determinazione dei gradi di libertà di un processo; cenni di bilancio di energia. Questiti principali per lo sviluppo di un processo. Cenni di analisi termodinamica di un processo: orientamento verso la massima conversione: effetto della temperatura, della pressione e del rapporto di alimentazione dei reagenti.

##### B) *Analisi termiche e termomeccaniche*

Principi dei metodi DTA, DSC, TGA e TMA. Esempi di applicazione dei metodi termici in campo organico, farmaceutico e dei materiali sia inorganici che polimerici. Determinazione dei diagrammi di fase e loro calcolo da parametri termodinamici.

##### C) *Stabilità dei prodotti e sicurezza dei processi*

Scala di laboratorio ed impianto pilota. Determinazione della stabilità termica mediante DSC, TGA e LARC; determinazione dei parametri termodinamici da misure termiche; misura della stabilità dei prodotti da misure isoterme ed a scansione; confronto dei due approcci. Simulazioni isoterme ed adiabatiche di reazioni chimiche da dati termici. Reattori computerizzati e calorimetri di rea-

zione; principi di funzionamento. Determinazione della stechiometria ed ottimizzazione di processi mediante reattori computerizzati – esempi di letteratura. Misura di calori di reazione – analisi di reazioni potenzialmente pericolose – esempi di letteratura.

#### D) Incidenti nell'industria chimica

Saranno analizzati e discussi alcuni incidenti alla luce dei dati chimici e termici disponibili in letteratura.

Saranno effettuati alcuni esperimenti di calorimetria e di analisi termica presso il laboratorio del docente.

### 31. CHIMICA INDUSTRIALE I

PROF. GIUSEPPE FAITA

- Esame di flow sheet quantificato di un impianto chimico (in alternativa: sintesi ammoniacale, sintesi urea e acido nitrico, produzione acido solforico e acido fosforico).
- Principi di corrosione (corrosione generalizzata, corrosione localizzata, tenso-corrosione).
- Leghe di uso industriale, tipi.
- Trattamenti termici delle leghe ferrose.
- Materiali di costruzione per fornaci petrolchimiche.
- Ciclo vapore negli impianti petrolchimici: trattamento delle acque di alimentazione e materiali di costruzione per caldaie di processo.
- Trattamento delle acque di raffreddamento.
- Materiali di costruzione per unità di assorbimento di anidride carbonica.
- Materiali di costruzione per sezioni fredde.
- Metodi di controllo qualità in accettazione e di controllo non distruttivo.
- Ispezione degli impianti chimici in esercizio e manutenzione.

### 32. IMPIANTI INDUSTRIALI CHIMICI II

PROF. PAOLO BELTRAME

#### Cinetica applicata

Richiami di cinetica chimica. Reazioni a stadi.

Catalisi acido-basica. Autocatalisi. Catalisi enzimatica. Catalisi eterogenea. Adsorbimento fisico e chimico. Modelli cinetici per le reazioni catalitiche. Limitazioni diffusive, efficacia dei catalizzatori.

Reazioni tra gas e solidi non catalitici. Reazioni tra gas e liquidi. Reazioni in sistemi trifasici gas-liquido-solido.

#### Processi e reattori chimici

Schemi di processo. Simboli e sigle. Schemi di regolazione.

Reattori discontinui. Reattori semicontinui. Reattori continui tubolari ideali. Reattori continui a completo mescolamento. Conversione e selettività nei diversi reattori. Effetti termici. Reattore continuo tubolare con riciclo. Distribuzione dei tempi di residenza nei reattori continui. Modelli di reattori a mescolamento parziale. Reattori gas-liquido. Colonne a gorgogliamento. Reattori trifasici. Reattori per processi gas+solido.

Programmi di calcolo semplificati relativi a reattori continui, termici e catalitici, ideali e non-ideali: esercitazioni al Personal Computer (in gruppi di 2-3 studenti).

Impianto pilota, impianto industriale: passaggi di scala. La sicurezza nei processi chimici. Limiti di infiammabilità. Esplosioni.

#### Tesii consigliati:

O. Levenspiel, *Ingegneria delle reazioni chimiche*, Ambrosiana, Milano, 1978.

L.M. Rose, *Chemical Reactor Design in Practice*, Elsevier, Amsterdam, 1981.

R. Raman, *Chemical Process Computations*, Elsevier, Amsterdam, 1985.

### 33. CHIMICA ORGANICA INDUSTRIALE

PROF. DARIO LANDINI

#### A. Il processo chimico

- 1) Lo sviluppo di processo. Ricerca di laboratorio e di impianto pilota.
- 2) La documentazione di processo. Il know-how. Il disegno di processo. L'ingegneria di base e di dettaglio.
- 3) I diagrammi di flusso. I diagrammi a blocchi. Il flow-sheet di processo.
- 4) Il reperimento di informazioni. La letteratura tecnica.
- 5) Brevettazione. L'analisi di un brevetto (cenni).
- 6) Processi omogenei ed eterogenei.
- 7) Processi continui e discontinui.
- 8) Legame fra la continuità dell'operazione e la produttività.
- 9) Scelta del reattore.
- 10) Reattori a letto fluido e a letto fisso.

#### B. Catalisi blanda nella sintesi organica industriale

- 1) Catalisi eterogenea e catalisi omogenea (cenni).
- 2) Catalisi per trasferimento di fase (CTF).
- 3) Principi generali della CTF.
- 4) Varie classi di catalizzatori di CTF.

- 5) Scelta del catalizzatore di CTF.
  - 6) Catalisi trasferimento liquido-liquido, solido-liquido, gas-liquido.
  - 7) Applicazione industriale della CTF.
- C. *Chimica e applicazioni industriali dei fluoro derivati organici*
- 1) Le caratteristiche "uniche" del legame C-F.
  - 2) Processi industriali di sintesi di composti perfluorati e parzialmente fluorurati.
  - 3) Applicazioni industriali di fluoroderivati organici. Fluoroclorocarburi. Problemi di impatto ambientali del Freon e possibili alternative. Perfluoroeteri e loro applicazioni. Fluoroderivati organici biologicamente attivi (sangue artificiale).
- D. *"Analisi Economica di un Processo Chimico"*
- 1) Obiettivi economici e non economici di una ricerca.
  - 2) Valutazione economica dei processi.
  - 3) Classificazione e struttura dei costi. Fonti di informazione dei prezzi. Elementi di costo variabili e fissi.
  - 4) Il consumo delle materie prime. I consumi energetici. La manodopera. La manutenzione. I costi generali.
  - 5) Il capitale fisso e il capitale circolante.
  - 6) L'investimento per costruire l'impianto. Economia di scala.
  - 7) L'utilizzazione economica delle strutture produttive. Break-even e margine di contribuzione.
  - 8) Il valore del denaro nel tempo. Interessi e fattori di sconto.
  - 9) Ammortamento. La vita utile dell'impianto. Ammortamento a quote fisse e a quote decrescenti.
  - 10) Il flusso di cassa.
  - 11) Parametri di valutazione economica di un progetto. Il ritorno sull'investimento. Pay-back time. Il flusso di cassa scontato (DCF). Il valore attuale del processo.
  - 12) Incertezza delle valutazioni economiche.

Testo

G.F. Pregaglia, *Analisi economica dei processi (CLUED)*.

Altro materiale fornito durante le lezioni.

### 34. METALLOGRAFIA

PROF. ENRICO SIVIERI

*La metallurgia di processo:*

materie prime, trattamenti preliminari, operazioni metallurgiche per via termica, idrometallurgia, elettrometallurgia, colata del metallo e solidificazione.

*Cenni di fisica dei metalli:*

metalli e leghe allo stato liquido, solidificazione, reticoli cristallini, trasformazioni allo stato solido, dislocazioni, meccanismi di rafforzamento.

*Diagrammi di stato delle leghe metalliche:*

regole generali per l'interpretazione dei diagrammi di stato, diagrammi a due componenti, diagramma ferro/carbonio.

*Trattamenti termici:*

generalità sui trattamenti termici, punti critici, curve di Bain, curve anisotermiche, temprabilità degli acciai, strutture metallografiche degli acciai, trattamenti termici di interesse applicativo, trattamenti termici non tradizionali.

*Metodi di studio e controllo dei materiali metallici:*

caratteristiche meccaniche, prove di resistenza a trazione, a compressione, a flessione, a scorrimento a caldo; prove di durezza, di resistenza all'urto, a fatica; microscopia ottica, elettronica, analisi EDS-WDS, analisi delle superfici, microscopia ad ultrasuoni, controlli non distruttivi.

*Proprietà del ferro ed influenza degli elementi aggiunti:*

gli acciai: acciai da costruzione, per utensili, inossidabili, per usi particolari; leghe.

*Metalli e leghe non ferrose:*

leghe leggere: leghe di alluminio, di magnesio, di titanio;  
leghe resistenti alla corrosione: leghe di nichel, cromo, molibdeno;  
leghe per scambio termico: leghe di rame;  
leghe per usi particolari.

*Metallurgia delle polveri.*

*Argomenti di tesi:*

- 1 Fenomeni di corrosione ad alta temperatura di leghe metalliche sotto deposito di sali fusi.
- 2 Problemi di corrosione negli impianti per la produzione di energia.
- 3 Monitoraggio dei processi di corrosione ad alta temperatura.

*Testo consigliato:*

W. Nicodem, *Metallurgia*, Masson Italia Ed. (1986).

### 35. TEORIA DEGLI ELETTROLITI

PROF.

Introduzione su elettroliti, polielettroliti e sospensioni colloidali. Complementi di termodinamica delle soluzioni elettrolitiche.

Teoria e tecnologia dei processi di: coagulazione e chiarificazione, microfiltrazione e ultrafiltrazione, osmosi inversa, elettrodialisi, scambio ionico.

Applicazione delle sopra citate tecnologie nei corrispondenti campi: processi chimici e parachimici, dissalazione acque, membrane ioniche nei processi elettrochimici industriali.

Le acque di caldaia: condizioni termoidrauliche e fenomeni di concentrazione locale e precipitazione, problemi di corrosione e incrostazione, condizionamento delle acque, problemi analitici di controllo.

Le acque di raffreddamento.

Le acque reflue: cenni sui trattamenti, ricicli delle acque di impianto.

## 36. ELETTOCHIMICA

PROF. SERGIO TRASATTI

### *Introduzione al corso*

Definizione di elettrochimica. Impatto tecnologico. Industrie e lavorazioni elettrolitiche. Generatori elettrochimici. applicazioni elettrochimiche in altri campi. Pila di Volta. Relazione tra scoperta e commercializzazione. Prospettive future dell'elettrochimica. Competizione delle auto elettriche col petrolio. Fonti rinnovabili di energia. Economia basata sull'idrogeno come combustibile. Scienza e applicazioni della scienza.

### *Energia di una paricella in una fase*

Vari tipi di potenziale. Potenziale elettrostatico. Potenziale di superficie. Parametri degli elettroni nei metalli. Struttura elettronica dei metalli. Potenziale di superficie dei metalli. Superfici policristalline. Potenziale chimico.

### *Stato standard*

Attività. Coefficienti di attività. Potenziale chimico di un elettrolita. Attività ionica media. Coefficienti di attività in scale diverse di concentrazione. Teoria di Debye-Hückel. Legge limite. Descrizione del modello. Spessore dell'atmosfera ionica. Deviazioni dei risultati dalla legge limite; massimo avvicinamento di due ioni. Interazioni a corto raggio. Teoria dell'idratazione. Coefficienti di attività di elettroliti misti. Associazione ionica in soluzione. Polielettroliti.

### *Equilibrio tra fasi*

Sale poco solubile. Caso del metallo/acqua. Equilibrio metallo/ione metallico. Equazione di Nernst. Misura di  $\Delta\phi$ . Elettrodi di riferimento. Elettrodi di I e II specie. Catena galvanica aperta. Componenti di  $\Delta\phi$ . Significato del potenziale misurato.  $\Delta E$  come differenza di energia elettronica.  $\Delta E$  come differenza di  $\Delta G$  per la reazione di cella. Derivazione termodinamica di  $\Delta G = -nF\Delta E$ .

### *Trasformazioni reversibili*

Confronto tra sistema chimico e sistema elettrochimico. Sistema elettrochimico reversibile. Reazioni parziali e totali. Misura di  $\Delta G$ ,  $\Delta S$ ,  $E^\circ$  e coefficienti di attività. Ciclo di Born-Haber. Potenziale assoluto. Scala dei potenziali. Scala redox. Elettrodi iono-selettivi, pH, pHmetro. Altri tipi di elettrodi iono-selettivi. Potenzimetri per analisi. Potenziale formale.

### *Leggi di Faraday*

Rendimenti di corrente, equivalente elettrochimico.

### *Conducibilità delle soluzioni*

Conducibilità specifica, conducibilità equivalente. Misura di conducibilità. Costante di cella. Caratteristiche di cella. Dipendenza della conducibilità della concentrazione. Numeri di trasporto. Metodo di Hittorf. Moto di uno ione. Raggio di Sokes. Effetti Falkenhagen e Wien. Effetto degli ultrasuoni. Effetto della T e P. Applicazioni della conducibilità.

### *Diffusione*

1<sup>a</sup> Legge di Fick, 2<sup>a</sup> Legge di Fick. Relazione tra diffusione e migrazione. Equazione di Planck-Einstein. Origine del potenziale di diffusione. Potenziale interliquido. Concetti fondamentali. Equazione di Henderson. Ponti salini. Il caso del KCl saturo. Celle con trasporto. Determinazione dei numeri di trasporto. Potenziale Donnan. Membrane iono-selettive. Elettrodo a vetro.

### *Interfasi polarizzabili e non polarizzabili*

Definizione di interfase polarizzabile. Circuiti equivalenti. Eccesso superficiale. Definizione di adsorbimento. Equazione di adsorbimento di Gibbs. Equazione elettrocapillare. Eccesso superficiale relativo. Curva elettrocapillare. Potenziale di carica zero. Capacità differenziale. Relazioni termodinamiche. Ottenimento dell'equazione elettrocapillare. Misura degli eccessi superficiali. Teoria di Gouy-Chapman. Confronto dati sperimentali con teoria. Adsorbimento specifico. Modello di Stern. Formule della teoria di Gouy-Chapman. Modello di Grahame. Condensatori in serie. Il potenziale di carica zero: da misura di capacità e con l'elettrodo a getto di Hg. Diagrama di Parsons e Zobel. Isotherme di adsorbimento. Test delle isotherme. Adsorbimento ionico e non ionico. Misure di capacità. Effetto del campo elettrico sull'adsorbimento. Relazione tra potenziale di carica zero e parametri strutturali dell'interfase. Componenti del potenziale di carica zero. Idrofilicità dei metalli. Cristalli singoli e policristalli. Interfaccia solido/ionico soluzione. Punto di carica zero. Titolazioni potenziometriche. Colloidi. Potenziale zeta. Punto isoelettrico. Fenomeni elettrocinetici.

### *Cinetica elettrochimica*

Curve dell'energia potenziale prima dell'equilibrio. Sistema dell'equilibrio. Termini chimici e termini elettrici. Equazioni cinetiche. Corrente di scambio. Determinazione del coefficiente di trasferimento  $\alpha$ . Significato di  $\alpha$ . Resistenza di reazione. Retta di Tafel. Estrapolazione della corrente di scambio. Confronto con la resistenza di reazione. Sovratensione di concentrazione e ohmica. Origine della caduta ohmica non compensata.

### *Effetto dello stato di carica dell'elettrodo sulla cinetica*

Adsorbimento specifico. Ordine di reazione a potenziale e a sovratensione costante. Energia di attivazione a potenziale e a sovratensione costante. Effetto dello stato di carica dell'elettrodo. Effetto dell'adsorbimento specifico di specie ioniche e neutre.

### *Meccanismi a più stadi*

Numero stechiometrico. Determinazione del numero stechiometrici. Meccanismi della reazione di sviluppo di idrogeno. Relazione tra pendenza della retta di Tafel e meccanismo di reazione. Retta di Tafel a due pendenze. Effetto del grado di copertura della superficie elettrodica con intermedi di reazione. Stadio chimico come cineticamente determinante. Equazione cinetica generalizzata. Principi di elettrocatalisi. Effetti primari e secondari del materiale elettrodico. Curve a "vulcano".

### *Tecniche sperimentali per lo studio dei fenomeni elettrochimici*

Curve potenziostatiche e galvanostatiche. Curve potenziodinamiche. Voltammetria ciclica. Esempio del platino. Step di corrente (cronopotenziometria). Correzione delle cadute ohmiche non compensate. Step di potenziale (cronocoulometria).

## **37. MISURE ELETTRICHE**

PROF.SSA SANDRA RONDININI

### *Generalità*

Classificazione degli strumenti di misura. Richiami di elettrologia. Strumenti analogici e digitali

### *Misure di grandezze elettriche*

Corrente, tensione, resistenza. Il multimetro.

### *Caratteristiche dei circuiti in corrente alternata*

Misure di impedenza. Elementi e circuiti raddrizzatori.

### *Sistemi generatori di corrente continua*

Pile a batterie primarie.  
Pile a batterie secondarie.

### *Misure di f.e.m.*

Il potenziometro. Il voltmetro elettronico. Problemi metrologici inerenti all'uso di elettrodi ione-selettivi per misure di pH e di pIone.

### *Misure di grandezze fisiche*

Sensori di strumentazione per misure di:  
- temperatura;

- pressione;
- portata;
- livello.

### *Strumenti registratori e oscilloscopi*

### *Regolazione automatica e controllo di processo*

Generalità. Risposta dinamica del processo e del regolatore. Azioni ON-OFF, proporzionale, integrale, derivativa e loro combinazioni. Sistemi feedback, feedforward, cascade, adaptive, ratio. Controllo centralizzato e distribuito. Esempi di regolazione delle variabili di un processo. Nel corso dell'anno vengono svolte esercitazioni pratiche a scopo dimostrativo.

### *Testi consigliati:*

M. Douglas Considine. *Process Instrumentation and Controls Handbook*, (reperibile presso la biblioteca di Chimica).

A.J. Bouwers, *Digital Instrumentation*, F.G. Shinsky, *Process-control Systems; e Practical Process Instrumentation and Control*, Chemical Engineering Magazine (tutti e tre reperibili presso il titolare del corso), INSTRUMENTATION VIDEO SET: gruppo di tre videocassette dimostrative sul Controllo automatico di processo: I. Basic Automatic Process Control, II. Advanced Process Control, III. Digital Control Techniques in visione presso i CTU).

Ogni settimana vengono forniti agli studenti appunti, deplianti, disegni di circuiti, ecc., a copertura degli argomenti trattati.

## **38. PREPARAZIONI DI CHIMICA ORGANICA**

PROF. DARIO LANDINI

Il corso riguarda i grandi capitoli della sintesi organica, visti in chiave industriale. In particolare i processi di sintesi (scelta delle materie prime, dei reattivi, dei solventi, delle condizioni operative e delle operazioni per l'isolamento e la purificazione dei prodotti) vengono trattati dal punto di vista dell'applicazione industriale. Il contenuto del corso è una descrizione dettagliata dei principali processi organici (*Processi unitari*) che riguardano: nitrizzazione, amminazione (per riduzione, amminolisi e amminolisi), solfonazione.

Per ognuno di questi processi viene data una descrizione generale delle condizioni operative (reagenti, solventi, temperature, pressioni, ecc.), mentre per alcune delle sintesi industriali più significative vengono discussi in dettaglio i "flow-sheets".

In tutte le operazioni viene dato un particolare rilievo ai problemi relativi alla sicurezza e all'igiene ambientale dei vari processi.

Sono organizzate visite a industrie chimiche e seminari su argomenti che riguardano la sicurezza e l'igiene ambientale dei processi.



#### Testi consigliati:

Faith, *Industrial Chemical*, John Wiley, 1975.  
Kirk-Othmer, *Encyclopedia of Chemical Technology*, III, ed. 1981/82.  
Mc Ketta, *Encyclopedia of Chemical Processing and Design*, M. Dekker, 1979.  
Ullmann's *Encyclopedia of Industrial Chemistry*, VCH Verlagsgesellschaft MBH, 1985.

#### Corso integrativo

Detergenza e suo Impatto Ambientale e Tecnologie di Depurazione delle Acque Reflue Civili e Industriali.

#### Programma del corso integrativo (Prof. G. Bresan)

Generalità sulla composizione dei formulati e le relative materie prime.  
Aspetti di carattere chimico-fisico del processo di lavaggio inerenti all'azione detergente dei tensioattivi.  
Aspetti di carattere chimico e chimico-fisico relativi all'azione degli altri componenti del formulato (builders, antiridepositanti, sbiancanti ed enzimi).  
Principi generali sulle caratteristiche delle acque di rifiuto, sulla loro depurazione e relative tecnologie sul trattamento e smaltimento dei fanghi.  
Inquinamento da acque di rifiuto di origine civile, con particolare riferimento alla componente detersivistica: prevenzione, processi di depurazione, effetti ambientali.  
Inquinamento di fonte industriale: prevenzione e processi di depurazione in casi significativi. Conseguenze ambientali e legislazione.  
Inquinamento di origine agricola, con particolare riferimento agli allevamenti intensivi: conseguenze ambientali, trattamento e utilizzo degli scarichi.

## 39. CHIMICA DELLE MATERIE PLASTICHE

### (Chimica Macromolecolare)

PROF. MARIO FARINA

#### 1) Introduzione

Nozioni fondamentali. Criteri statistici in chimica macromolecolare. Polimeri lineari, ramificati, reticolati. Omopolimeri e copolimeri. Peso molecolare e grado di polimerizzazione. Diversi tipi di medie nella determinazione dei pesi molecolari. Indice di polidispersità. Nozione preliminare sulla sintesi di macromolecole. Policondensazione. Poliaddizione di monomeri vinilici e dienici. Polimerizzazione con apertura di anello e con isomerizzazione.

#### 2) Struttura dei polimeri

Richiami di stereochimica. Analisi configurazionale di composti a catena con due o più atomi asimmetrici. Analisi conformazionale di molecole lineari e ramificate con più di cinque atomi di carbonio. Trattazione quantitativa dell'analisi conformazionale (metodo di Westheimer).

Stereochimica macromolecolare. Problemi conformazionali: disposizione a zig-

zag, ad elica e gomito. Problemi configurazionali: polimeri isotattici, sindiotattici, atattici e a stereoblocchi, cis e trans tattici. Cristallinità di polimeri. Uso di metodi spettroscopici nello studio delle strutture macromolecolari. Microtatticità.

#### 3) Proprietà in soluzione e misura del peso molecolare

Aspetti fenomenologici della dissoluzione dei polimeri. Parametri di solubilità. Cenni sulla termodinamica delle soluzioni macromolecolari. Teoria di Flory-Huggins, temperatura  $\theta$ . Osmometria e altri metodi colligativi per la misura del peso molecolare medio numerale.

Determinazione del peso molecolare medio ponderale mediante diffusione della luce: caso della particella puntiforme e della particella estesa, diagramma di Zimm. Cenni sull'ultracentrifugazione.

Viscosimetria: aspetti sperimentali e teorici. Teoria di Flory-Fox. Dimensioni non perturbate: relazione fra proprietà idrodinamiche e conformazionali delle macromolecole. Calcolo del rapporto caratteristico. Frazionamento dei polimeri. Tecniche GPC e HPLC.

#### 4) Proprietà in massa dei polimeri

Morfologia di polimeri cristallini, orientamento dei cristallini sotto tiro. Temperatura di fusione ( $T_f$ ), storia termica dei polimeri. Stato vetroso, temperatura di transizione vetroso ( $T_g$ ). Dipendenza di  $T_f$  e  $T_g$  dalla struttura dei polimeri, modifica di dette temperature.

Proprietà meccaniche dei polimeri. Curve sforzo-allungamento di polimeri amorfi (sopra e sotto  $T_g$ ) e di polimeri cristallini. Cenni sul comportamento elastico delle gomme. Viscoelasticità: rilassamento e scorrimento. Modifica delle proprietà meccaniche: uso di cariche, materiali compositi.

#### 5) Sintesi e reazioni di macromolecole

Policondensazione: principali tipi di monomeri e di reazioni. Cinetica di policondensazione. Distribuzione e regolazione dei pesi molecolari. Policondensati lineari e reticolati e loro importanza industriale. Punto di gel.

Considerazioni termodinamiche sulle poliaddizioni.

Polimerizzazioni radicaliche: studio cinetico, regolazione del peso molecolare.

Aspetti tecnici della polimerizzazione radicalica, processi in massa, in sospensione, in soluzione e in emulsione. Polimeri di importanza industriale.

Polimerizzazione anioniche e cationiche. Polimeri viventi, copolimeri a blocchi.

Polimerizzazione ioniche stereospecifiche.

Polimerizzazione Ziegler-Natta. Meccanismo e stereospecificità, catalizzatori eterogenei ed omogenei. Prodotti di interesse industriale: polietilene ad alta densità, polipropilene, copolimeri, terpolimeri, polibutadiene, poliisoprene e polipentamero.

Copolimerizzazione, rapporti di reattività, diagrammi  $F_1-f_1$ . Distribuzione delle sequenze di unità monomeriche. Previsione dei rapporti di reattività. Schema Q-e.

Reazioni dei polimeri. Degradazione. Stabilizzazione.

#### 6) Tecnologia dei materiali polimerici

Impiego dei materiali polimerici e tecnologia della loro lavorazione. Fibre. Gomme. Vulcanizzazione. Importanza industriale dei materiali polimerici. Pro-

blemi di approvvigionamento e di produzione delle materie prime, degli intermedi e degli additivi.

#### 7) Biopolimeri

Aspetti macromolecolari delle sostanze naturali. Prodotti idrocarburi (gomma naturale). Polisaccaridi (amido e cellulosa). Proteine. Acidi nucleici, struttura primaria, secondaria e terziaria.

#### Testi consigliati:

AA.VV. *Scienza e tecnologia delle macromolecole*, Pacini Editore, Pisa 1983. Volume primo.

AA.VV. *Lezioni tenute ai Convegni-Scuola dell'Associazione Italiana di Scienza e tecnologia delle macromolecole 1979-1983*.

## 40. CORROSIONE E PROTEZIONE DEI METALLI

PROF. FRANCESCO MAZZA

### PARTE I

#### Generalità

Definizioni. Velocità di corrosione. Andamento della corrosione nel tempo. Significato tecnico ed economico della corrosione.

### PARTE II

#### Corrosione in ambiente acquoso

Generalità. Natura elettrochimica dei fenomeni di corrosione. Forme di corrosione. Termodinamica dei processi di corrosione. Processi anodici e catodici. Diagrammi potenziale-pH. Cinetica dei processi di corrosione. Riduzione catodica dell'ossigeno. Evoluzione d'idrogeno. Processi catodici di depolarizzazione. Passività. Dissoluzione delle leghe. Teoria dei potenziali misti. Teoria degli elementi galvanici in corto circuito. Misura sperimentale del potenziale anodico, catodico e di corrosione. Misura della velocità di corrosione con metodi elettrochimici. Resistenza di polarizzazione. Processi controllanti. Protezione catodica ed anodica. Dipendenza dei fenomeni di corrosione dal tempo. Polarizzazione chimica, di concentrazione. Intervento di strati filmanti. Fattori termodinamici e cinetici di localizzazione della corrosione umida. Fattori che influenzano la velocità di corrosione umida, temperatura, pressione, turbolenza, fattori geometrici.

### PARTE III

#### Morfologia della corrosione in presenza di acqua condensata e condizioni tipiche di corrosione

Corrosione per contatto, per vaiolatura, intestiziale, per fatica, sotto sforzo, per sfregamento, intergranulare. Danneggiamento di idrogeno, Corrosione delle

strutture interrato. Corrosione biologica. Corrosione marina. Corrosione atmosferica. Corrosione per correnti disperse. Corrosione nelle acque naturali ed industriali. Corrosione in ambienti organici.

### PARTE IV

#### Metodi di protezione

Metodi di protezione che interessano l'ambiente, inibitori anodici, catodici, di adsorbimento, da imballaggio, in fase vapore, metodi di protezione con strati ricoprenti, protezione passiva, protezione mista. Strati di convenzione, ossidazione, anodica, fosfatizzazione. Strati depositati a caldo. Strati depositati per via galvanica. Imperfezioni nei ricoprimenti metallici. Tecniche di protezione catodica.

### PARTE V

#### Corrosione ad alta temperatura

Generalità. Aspetti termodinamici e cinetici. Teoria di Wagner. Conduttori ionici ed elettronici. Semiconduttori. Fattori di velocità. Corrosione secca delle leghe. Ossidazione interna. Corrosione da sali fusi.

### PARTE VI

#### Metodi di studio della corrosione

Generalità. Indagini diagnostiche. Prove di corrosione. Determinazione ed espressione dei risultati delle prove di corrosione. Prove fondamentali di laboratorio. Prove di controllo e di collaudo. Prove di servizio. Rischio. Affidabilità. Informazione. Tecniche di ispezione e prove non distruttive. Dati di corrosione per le scelte di progetto e di manutenzione correttiva. Scelte di progetto e di manutenzione correttiva. Sistemi esperti. Riviste specializzate e fondamentali bibliografici. Abstracts.

#### Libro di testo

G. Bianchi, F. Mazza, *Corrosione e protezione dei metalli*, Ed. Masson s.p.a., Milano, 1985.

## 41. ELETTROCHIMICA INDUSTRIALE

PROF.SSA SANDRA RONDININI

#### Introduzione

L'industria elettrochimica. Tipi di reazioni tecnologiche. Caratteristiche di elettrodi per tecnologia.

#### Valutazioni di processo

Costi. Parametri di merito. Parametri di elettrolisi: potenziale, materiali elettrodi, speci attive, temperatura, pressione.

### *Principi di disegno di cella*

Tecnologia addizionale dei processi elettrolitici. Trasporto di materia in celle elettrolitiche. Distribuzione di corrente. Connessione di celle. Tipologia dei reattori elettrochimici. Celle discontinue e continue. Celle a pompa, capillari, a letto fluido.

### *Condizioni di equilibrio*

Energia di attivazione. Coefficiente di trasferimento. Corrente di scambio.

### *Scostamento dell'equilibrio*

Retta di Tafel. Trasporto di materia. Ordine di reazione, energia di attivazione e effetto dello stato di carica dell'elettrodo. Effetto assorbimento specifico.

### *Meccanismo di reazione*

Reazioni a catena. Numero stechiometrico. Velocità globale di reazioni a più stadi. Evoluzione di idrogeno, ossigeno e cloro. Riduzione catodica di ossigeno. Cambiamento di pendenza della retta di Tafel. Equazione cinetica generalizzata.

### *Elettrocatalisi*

Relazione tra parametri elettrochimici e proprietà fisiche dei materiali. Orientazione del solvente all'interfase. Curve carica-potenziale e natura del materiale. Elettrocatalisi diretta e indiretta. Elettrocatalisi della reazione dell'idrogeno. Curva a vulcano. Correlazioni fase gas/fase soluzione.

### *Metodi di studio di reazioni elettrodiche*

Voltammeteria. Effetto caduta chimica non compensata. Sistema redox reversibile e irreversibile. Effetto adsorbimento reagenti e prodotti: pre-onde e post-onde. Adsorbimento di idrogeno e ossigeno. "Underpotential deposition" (UPD) di metalli. Cronopotenziometria. Il problema della purificazione delle soluzioni.

### *Proprietà di metalli*

Curva voltammetrica e cronopotenziometria del platino. Adsorbimento di ioni e sostanze organiche. Evoluzione di ossigeno. Teoria della doppia barriera. Proprietà elettrochimiche di iridio, rutenio, rodio, palladio, osmio e oro. Scala di reattività verso l'ossigeno e l'idrogeno.

### *Proprietà di ossidi*

Generalità su ossidi di metalli di transizione. Parametri della reazione di produzione del cloro. Preparazione e proprietà di  $\text{RuO}_2$ . Evoluzione di ossigeno e cloro su  $\text{RuO}_2$ . Altri elettrodi ad ossido:  $\text{IrO}_2$ ,  $\text{Co}_3\text{O}_4$ ,  $\text{MnO}_2$ ,  $\text{NiCo}_2\text{O}_4$ , etc. Scala di reattività degli ossidi ed elettrocatalisi.

## **42. CHIMICA ORGANICA APPLICATA (corso libero pareggiato)**

PROF. STEFANO MAIORANA

Si prendono in esame classi di prodotti biologicamente attivi di grande importanza pratica e commerciale: per ciascuna classe vengono date notizie sul me-

canismo di azione, sui metodi di valutazione dell'attività biologica in vitro ed in vivo con notizie riguardanti le correlazioni struttura-attività.

Vengono descritte le più comuni vie di accesso (fermentazione, sintesi) facendo emergere le problematiche connesse.

Particolare rilievo viene dato ai criteri che indirizzano, a livello industriale, le scelte riguardanti la ricerca e sviluppo di nuovi prodotti oltre ad illustrare l'iter di sviluppo di un nuovo farmaco compresi i problemi brevettuali (illustrati da un esperto del campo).

Si tengono inoltre alcune lezioni sulla ricerca bibliografica manuale e on-line. Durante il corso potranno anche tenersi esercitazioni di vario tipo (ricerca bibliografica, progettazione di sintesi di prodotti industriali ecc.).

### 1) *Anti-infiammatori non-steroidi*

Derivati dall'acido benzoico

Derivati degli acidi arilacetici

Derivati dagli acidi  $\alpha$ -arilpropionici

Derivati oxicam

### 2) *Derivati con attività antibatterica*

A) Antibiotici  $\beta$ -lattamici

Penicilline e Penicilline semisintetiche

Cefalosporine e Cefalosporine semisintetiche

Penem e derivati

Tienamicina

Nocardicine

Monobattami

B) Antibiotici di strutture varie (cenni)

Macrolidi

Amminoglicosidi

Tetracicline

Licomidine

Polipeptidi

Altri

C) Nuovi antibatterici di sintesi: derivati chinolonici

Chinoloni di I generazione

Chinoloni di II generazione

### 3) *Legislazione brevettuale*

Viene definita la proprietà industriale, l'oggetto del brevetto, la prassi brevettuale con cenni alla legislazione brevettuale in Italia e nel mondo e con particolare riferimento alle classi di farmaci prese in esame. Tappe dello sviluppo di un nuovo farmaco.

### 4) *Composti ad attività insetticida*

Caratteristiche generali, classificazione, cenni su meccanismi d'azione.

Vengono esaminati in particolare i fenomeni in relazione al loro utilizzo ed ai metodi di sintesi.

5) *Ricerca bibliografica manuale*

Vantaggi e svantaggi della ricerca on-line, vie di accesso ai Database. Comandi fondamentali per l'interrogazione del C.A.

Agli studenti viene fornito materiale didattico sotto forma di fotocopie dei lucidi discussi a lezione.

**CONSIGLIO DEL CORSO DI LAUREA  
IN CHIMICA INDUSTRIALE**

**PRESIDENTE**

Prof. Paolo Beltrame - Dipartimento di chimica fisica ed elettrochimica sez. A -  
Via Golgi 19

**SEGRETARIO**

Prof. Michele Rossi - Dipartimento di chimica inorganica e metallorganica - Via  
Venezian, 21

**SEGRETERIA DEL C.C.L.**

Sig. Orazio Maccarone - Via Venezian, 21

Orario 11-12 14-15 dal lunedì al venerdì

Informazioni

Orario delle lezioni

Domanda di entrata in tesi

Varie

**RAPPRESENTANTI DEGLI STUDENTI NEL C.C.L.**

Sig. Lucia Toscano

Sig. Stefania Leonardi

Sig. Marco Mapelli

**COMMISSIONE PIANI DI STUDIO E TRASFERIMENTI**

Prof. Sergio Trasatti - Dip. di chim. fis. ed elettr. Sez. B

Prof. Lucio Forni - Dip. di chim. fis. ed elettr. Sez. A

Prof.ssa Rita Annunziata - Dip. Chim. Org. e Ind.

**COMMISSIONE PER LA TESI DI LAUREA**

Prof. Francesco Mazza presidente - Dip. chimica fisica ed elettrochimica sez. B

Prof. Piercarlo Fantucci - Dip. chimica inorganica e metallorganica

Prof. Stefano Maiorana - Dip. Chimica organica e industriale

**ISCRITTI A CHIMICA INDUSTRIALE PER L'A.A. 1990/91**

Anno di Corso

I	II	III	IV	V	F.C.
167	124	106	101	62	77

Totali Iscritt: 537

**CORSO DI LAUREA IN CHIMICA INDUSTRIALE  
ELENCO ALFABETICO DEGLI INSEGNAMENTI**

N.O. = Nuovo Ordinamento

	programma	n°	pag.
CALCOLO NUMERICO E PROGRAMMAZIONE (N.O.)		12	
CHIMICA ANALITICA		17	
CHIMICA ANALITICA (N.O.)		5	
CHIMICA ANALITICA STRUMENTALE (N.O.)		14	
CHIMICA BIOLOGICA (N.O.)		16	
CHIMICA DELLE MATERIE PLASTICHE		39	
CHIMICA FISICA INDUSTRIALE		25	
CHIMICA FISICA 1° corso (N.O.)		13	
CHIMICA FISICA I		22	
CHIMICA FISICA II		26	
CHIMICA GENERALE E INORGANICA (N.O.)		1	
CHIMICA INDUSTRIALE I		31	
CHIMICA INDUSTRIALE II (ORGANICA)		29	
CHIMICA ORGANICA 1° corso (N.O.)		8	
CHIMICA ORGANICA II		19	
CHIMICA ORGANICA APPLICATA		42	
CHIMICA ORGANICA INDUSTRIALE		33	
COMPLEMENTI DI CHIMICA ORGANICA		20	
CORROSIONE E PROTEZIONE DEI METALLI		40	
ELETTROCHIMICA		36	
ELETTROCHIMICA INDUSTRIALE		41	
ESERC. DI ANALISI CHIMICA QUANTITATIVA		18	
ESERCITAZIONI DI CHIMICA FISICA I		23	
ESERCITAZIONI DI CHIMICA FISICA II		27	
ESERCITAZIONI DI CHIMICA INDUSTRIALE I		30	
ESERCITAZIONI DI CHIMICA INDUSTRIALE II		21	
FISICA GENERALE 1° corso (N.O.)		4	
FISICA GENERALE 2° corso (N.O.)		10	
IMPIANTI INDUSTRIALI CHIMICI I		28	
IMPIANTI INDUSTRIALI CHIMICI II		32	
ISTITUZIONI DI MATEMATICHE 1° corso (N.O.)		3	
ISTITUZIONI DI MATEMATICHE 2° corso (N.O.)		7	
LABORATORIO DI CHIMICA ANALITICA (N.O.)		6	
LABORAT DI CHIMICA ANALITICA STRUMENTALE (N.O.)		5	
LABORAT DI CHIMICA GENERALE E INORGANICA (N.O.)		2	
LABORATORIO DI CHIMICA ORGANICA 1° corso (N.O.)		9	
METALLOGRAFIA		34	
MINERALOGIA CON ESERCITAZIONI PRATICHE		24	
MISURE ELETTRICHE		37	
PREPARAZIONI DI CHIMICA ORGANICA		38	
TEORIA DEGLI ELETTROLITI		35	

**CORSO DI LAUREA IN CHIMICA INDUSTRIALE  
ELENCO ALFABETICO DEI DOCENTI E LORO SEDI**

(O) = Ordinario, (A) = Associato, (R) = Ricercatore

			programma n°	pag.
ALESINA	Alberto	(A) Dip. Matematica	7	
ANNUNZIATA	Rita	(A) Dip. Chim. Org. Ind.	21	
ARANEO	Antonio	(A) Dip. Chim. Inorg e Metallorg.	5-6	
BANDITELLI	Guido	(A) Dip. Chim. Inorg e Metallorg.	2	
BELTRAME	Paolo	(O) Dip. Chim. Fis. ed Elettr.	32	
BELTRAME	Pierluigi	(A) Dip. Chim. Fis. ed Elettr.	27	
CARNITI	Paolo	(A) Dip. Chim. Fis. ed Elettr.	22	
CAZZANIGA	Franco	(A) Dip. di Matematica	12	
CINQUINI	Maurò	(O) Dip. Chim. Org. e Ind.	8	
COLZANI	Leonardo	(O) Dip. Matematica	3	
CURTI	Bruno	(A) Dip. Fisiol. Biochim. Gen.	16	
DI SILVESTRO	Giuseppe	(A) Dip. Chim. Org. e Ind.	30	
FAITA	Giuseppe	(A) Dip. Chim. Fis. ed Elettr.	31	
FANTUCCI	Piercarlo	(A) Dip. Chim. Inorg. Met.	18	
FARINA	Mario	(O) Dip. Chim. Org. e Ind.	39	
FAVINI	Giorgio	(O) Dip. Chim. Fis. ed Elettr.	13-26	
FIORI	Giorgio	(A) Dip. Chim. Fis. ed Elettr.	27	
FORNI	Lucio	(A) Dip. Chim. Fis. ed Elettr.	25	
GULLOTTI	Michele	(A) Dip. Chim. Inorg. Met.	14-15	
LANDINI	Mario	(O) Dip. Chim. Org. e Ind.	33-38	
MAIORANA	Stefano	(O) Dip. Chim. Org. e Ind.	19-42	
MANITTO	Paolo	(O) Dip. Chim. Org. Ind.	9	
MARI	Claudio	(A) Dip. Chim. Fis. ed Elettr.	23	
MAZZA	Francesco	(O) Dip. Chim. Fis. ed Elettr.	40	
MONTANARI	Fernando	(O) Dip. Chim. Org. e Ind.	29	
PELIZZONI	Francesca	(O) Dip. Chim. Org. e Ind.	20	
PIZZOTTI	Maddalena	(A) Dip. Chim. Inorg. e Metallorg.	2	
RAGAINI	Vittorio	(O) Dip. Chim. Fis. ed Elettr.	28	
RONDININI	Sandra	(A) Dip. Chim. Fis. ed Elettr.	37-41	
ROSSI	Michele	(O) Dip. Chim. Inorg. e Metallorg.	1	
SIVIERI	Enrico	(A) Dip. Chim. Fis. ed Elettr.	34	
SOZZANI	Piero	(A) Dip. Chim. Org. e Ind.	21	
SPINOLO	Giorgio	(O) Dip. Fisica	4	
TRASATTI	Sergio	(O) Dip. Chim. Fis. ed Elettr.	36	
UGO	Renato	(O) Dip. Chim. Inorg. e Metallorg.	17	
ZUFFI	Lina	(A) Dip. Fisica	10	

**INDIRIZZI DEI DIPARTIMENTI E DEGLI ISTITUTI  
SEDI DEI DOCENTI DEI CORSI DI LAUREA IN CHIMICA E  
IN CHIMICA INDUSTRIALE**

- Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica  
Sezione A Via Golgi, 19  
Sezione B Via Venezian, 21
- Dipartimento di Chimica Inorganica e Metallorganica  
Via Venezian, 21
- Dipartimento di Chimica Organica e Industriale  
Via Venezian, 21
- Dipartimento di Fisiologia e Biochimica Generali  
Via Celoria, 26
- Dipartimento di Matematica  
Via Saldini, 50
- Dipartimento di Scienze Fisiche  
Via Celoria, 16
- Dipartimento di Scienze della Terra, Sezione di Mineralogia, Petrografia e  
Geochimica  
Via Boticelli, 23
- Istituto Chimica Strutturistica Inorganica  
Via Venezian, 21

## APPENDICE A

### ELENCO DEGLI ARGOMENTI DI TESI DISPONIBILI

Presso Istituti e Dipartimenti Chimici di via Venezian, 21.

#### **Avvertenze**

Gli argomenti di Tesi qui riportati si intendono adatti sia per studenti di Chimica Industriale a meno che non sia chiaramente espressa l'idoneità per studenti dell'uno e dell'altro Corso di Laurea sopra nominato.

Gli argomenti di Tesi qui riportati sono quelli pervenuti a questa Segreteria e hanno valere di prima informazione.

LA SEGRETERIA DIDATTICA

## ISTITUTO DI CHIMICA STRUTTURISTICA INORGANICA

<i>Proponente</i>	<i>Argomento N°</i>
Prof. BELLON	1
Prof. CIANI	1
Dr. DE MARTIN	1
Prof. MANASSERO	1
Prof.ssa SANSONI	1
Prof. SCATTURIN	1
Prof. SIRONI	1

### 1. PROF.: P.L. BELLON, G. CIANI, M. MANASSERO, M. SANSONI, V. SCATTURIN, A. SIRONI, F. DE MARTIN

#### Argomento della tesi

Vengono svolte ricerche strutturali su complessi mono e poli nucleari di metalli di transizione. L'attività di tesi consiste generalmente nello studio completo di una o più strutture di tali sostanze per mezzo della diffrazione di raggi X. Il lavoro di tesi comprende una parte sperimentale che consiste nella caratterizzazione della simmetria e di altre proprietà cristallografiche della specie in esame e nella raccolta automatica delle intensità diffratte. Segue una parte di elaborazione dei dati sperimentali che richiede l'uso di calcolatori elettronici. Il laureando acquista, pertanto, un'esperienza di validità del tutto generale nel campo dell'acquisizione computerizzata di dati sperimentali e della loro elaborazione mediante calcolatore.

Un tipo diverso di attività riguarda lo studio sperimentale di materiali e di dispositivi elettronici (soprattutto optoelettronici) quali diodi e laser. Il lavoro di ricerca consiste nello studio cristallografico di campioni preparati in laboratori di ricerca industriale, nell'uso di elaboratori elettronici per l'acquisizione dati e per la elaborazione degli stessi. Il laureando acquisisce, oltre alla esperienza cristallografica, la conoscenza dei linguaggi dei sistemi operativi di microprocessori.

**Note:** Alla fine della tesi di laurea, lo studente si sarà formato un bagaglio di conoscenze relative alle leggi e proprietà fondamentali della diffrazione dei raggi X (di notevole interesse scientifico e tecnologico), alle simmetrie cristalline, allo stato solido e alle strutture molecolari e avrà acquisito capacità di valutazione dei risultati di una ricerca strutturalistica. Un'altra specifica acquisizione sarà quella nel campo della conoscenza ed uso di linguaggi di programmazione e di sistemi operativi.

## DIPARTIMENTO DI CHIMICA INORGANICA E METALLORGANICA

<i>Proponente</i>	<i>Argomento N°</i>
Prof.ssa ANGOLETTA	1
Prof. ARANEO	2-12
Dr. ARDIZZOIA	14
Dr.ssa BANDINI	3
Prof. BANDITELLI	3
Prof.ssa BERINGHELLI	10
Prof. CARIATI	4
Prof. CASELLA	5
Prof. CENINI	6-17
Prof. CERIOTTI	7
Prof. CESAROTTI	9
Dott. CROTTI	6
Prof. D'ALFONSO	10
Dr. DELLA PERGOLA	7-19
Prof. FANTUCCI	10
Prof.ssa FRENI	11
Dr. FUMAGALLI	19
Prof. FUSI	21
Prof. GARLASCHELLI	14-19
Prof. GIUSTO	2-12
Prof. GULLOTTI	5
Prof. LA MONICA	13
Prof.ssa M.C. MALATESTA	14
Prof. MARTINENGO	19
Prof.ssa MORAZZONI	15
Prof. PACCHIONI	10
Prof. PASINI	16
Prof. PIZZOTTI	6
Prof.ssa PORTA	7
Dr.ssa PRATI	18
Dr. PSARO	20-21
Prof. ROSSI	18
Prof. SARTORELLI	19
Dr. TOLLARI	6-7
Prof. R. UGO	20
Prof. G.M. ZANDERIGHI	21



## 1. PROF.SSA ANGOLETTA MARIA

### Argomenti di tesi:

- 1) Composti di acetilene di Iridio con acetilene composti.
- 2) Reattività degli idruri dei metalli di transizione con DiAzoacetato di Etile.

Note: Solo per Chimici.

## 2. PROF. ARANEO ANTONIO, PROF. GIUSTO DOMENICO

### Argomenti di tesi:

- 1) Recupero di metalli da fanghi industriali. Ricerche sulla depurazione di scarichi industriali.

## 3. PROF. BANDITELLI GUIDO, DR.SSA BANDINI ANNA LAURA

### Argomenti di tesi:

- 1) Nuovi complessi di metalli del gruppo del platino con idrogeno: idruri di e trimetallici. Sintesi, studio di processi dinamici in soluzione e reattività con molecole organiche insature.
- 2) Complessi con leganti bidentati all'azoto e/o al fosforo di interesse strutturale, catalitico o farmacologico.
- 3) Costruzione di sistemi polieteterometallici non clusters: modelli semplici per lo studio di reattività su più centri metallici.
- 4) Impiego della spettrometria di massa nello studio di composti di coordinazione; relazioni tra la reattività di composti.

## 4. PROF. CARIATI FRANCESCO

### Argomenti di tesi:

- 1) Caratterizzazione della struttura e studio delle proprietà di nuovi materiali ceramici, semiconduttori e superconduttori, mediante le spettroscopie IR, Raman, EPR, UV-Visibile e Mössbauer.
- 2) Studio del meccanismo di trasporto e di accumulo del ferro nell'organismo mediante sintesi e caratterizzazione, utilizzando le spettroscopie EPR, Mössbauer, UV-Visibile, IR e Raman, di nuovi composti modello per le funzioni svolte dalle proteine transferrina e ferritina.

Note: Per studenti di Chimica, Chimica Industriale e Chimica e Tecnologia Farmaceutiche.

## 5. PROF. CASELLA LUIGI, PROF. MICHELE GULLOTTI

### Argomenti di tesi:

- 1) Sintesi di modelli di metallo-proteine e metallo-enzimi.
- 2) Catalisi ossidativa biomimetica; attivazione dell'ossigeno e di altre specie ossigenate.
- 3) Reattività di residui di aminoacidi Coordinati a ioni metallici; sistemi modello per la vitamina B<sub>6</sub>.
- 4) Caratterizzazione e attività di metallo-proteine naturali contenenti Cu e Fe.

## 6. PROF. CENINI SERGIO, PROF.SSA PIZZOTTI MADDALENA, DR. CORRADO CROTTI, DR. STEFANO TOLLARI

### Argomenti di tesi:

Composti organometallici nella sintesi organica:

- 1) Sintesi e reattività di composti organometallici con legami multipli metallo. Legante organico.
- 2) Sintesi di isocianati, carmabatti, uree e derivati eterociclici da nitro e nitroso derivati catalizzate da composti organometallici di metalli di transizione.
- 3) Formazione del legame carbonio-azoto per somma di ammine ad olefine catalizzata da composti organometallici di metalli di transizione.
- 4) Nuovi metalli inorganici reattività e attività catalitica di soluzioni colloidali di metalli.

## 7. PROF. CENINI SERGIO, PROF.SSA PORTA FRANCESCA, DR. STEFANO TOLLARI

### Argomenti di tesi:

- 1) Chimica organometallica: ossidazione stechiometrica e catalitica di composti organici azotati con osso e perosso complessi di metalli di transizione.

## 8. PROF. CERIOTTI ALESSANDRO, DR. DELLA PERGOLA ROBERTO

### Argomenti di tesi:

Composti polinucleari metallici, stabilizzati da leganti carbonilici.

- 1) Sintesi di composti omo ed eterometallici di elementi dell'VII gruppo.

- 2) Sintesi di composti metallici contenenti eteroatomi interstiziali.
- 3) Reattività dello scheletro metallico e dei gruppi leganti nei composti metallo-carbonilici.
- 4) Attivazione del monossido di carbonio e funzionalizzazione di substrati organici di interesse applicativo mediante l'uso di composti metallo-carbonilici.

**N.B.:** Le tesi prevedono l'impiego di apparecchiature atte alla manipolazione in atmosfera inerte; inoltre lo studente acquisirà familiarità con le principali tecniche di analisi spettroscopica.

## 9. PROF. CESAROTTI EDOARDO

### Argomenti di tesi:

- 1) Sintesi, caratterizzazione e reattività di complessi di metalli di transizione chirali al centro metallico.
- 2) Riduzione catalitica e stechiometrica stereocontrollata di substrati prochirali con complessi di metalli di transizione.
- 3) Creazione di stereocentri mediante formazione di legami C-C, tramite complessi chirali di metalli di transizione.

## 10. PROF. D'ALFONSO GIUSEPPE, DR.SSA BERINGHELLI TIZIANA

### Argomenti di tesi:

- 1) Studio della reattività e indagini sui meccanismi di reazione in composti organometallici mono e polinucleari.
- 2) Preparazione di nuovi catalizzatori a partire da clusters omo ed eterometallici eterogeneizzati su supporti inorganici.
- 3) Studio tramite spettroscopia NMR mono e bidimensionale delle proprietà strutturali e dinamiche di composti organometallici.

**Note:** Le tesi possono prevedere (bilanciate secondo gli interessi dello studente) una parte di lavoro di laboratorio e una parte di elaborazione numerica dei risultati (modelli cinetici) o di uso di tecniche NMR avanzate.

## 11. PROF. FANTUCCI PIERCARLO, PROF. PACCHIONI GIANFRANCO

### Argomenti di tesi:

- 1) Indagine teorica sulla struttura e sulle proprietà elettroniche di clusters metallo-carbonilici (per Chimici).

- 2) Studio teorico dell'interazione tra superfici di ossidi e clusters supportati.
- 3) Relazioni tra struttura elettronica, proprietà e reattività in complessi inorganici.

**Note:** Le tesi proposte consistono nell'utilizzo di programmi di calcolo quantomeccanico e sono consigliabili a studenti interessati all'uso del computer in chimica.

## 12. PROF. FRENI MARIA

### Argomenti di tesi:

- 1) Comportamento dell'acido ascorbico con complessi di rame e zinco (solo per Chimici).

## 13. PROF. GIUSTO DOMENICO, PROF. ARANEO ANTONIO

### Argomenti di tesi:

- 1) Ricerche per recupero di metalli da fanghi industriali e soluzioni: individuazione di processi chimici e chimico fisici per la separazione ed il recupero.
- 2) Ricerche sull'innocuizzazione dei fanghi derivanti dai processi di depurazione industriale.
- 3) Analisi di cicli produttivi finalizzate alla individuazione delle migliori tecnologie per la minimizzazione degli impatti di talune lavorazioni sull'ambiente di lavoro ed esteri.
- 4) Definizione quali-quantitative delle tipologie di rifiuti derivanti dalle lavorazioni industriali.

**Note:** Le ricerche suddette si prefiggono:  
- la verifica scientifica dei metodi individuati;  
- la verifica tecnica al fine di definire la loro fattibilità attraverso costi-benefici.

## 14. PROF. LA MONICA GIROLAMO, DR. G. ATTILIO ARDIZZOIA

### Argomenti di tesi:

- 1) Attivazione e funzionalizzazione del biossido di carbonio mediante reazioni assistite dal centro metallico: formazione di legami C-C e C-N.

- 2) Attivazione dell'ossigeno molecolare ed ossidazione di substrati organici per mezzo di reazioni assistite da complessi metallici.

### 15. PROF.SSA MALATESTA MARIA CARLOTTA, PROF. GARLASCHELLI LUIGI

#### Argomenti di tesi:

- 1) Sintesi e reattività di anelli pentatomici insaturi contenenti platino come intermedi di processi di polimerizzazione.

#### Note:

Verranno utilizzate per lo studio delle reazioni e la caratterizzazione dei complessi, Spettroscopia IR,  $^1\text{H}$ NMR,  $^{13}\text{C}$ NMR,  $^3\text{P}$ NMR,  $^{195}\text{Pt}$ , NMR, MASSA, ecc.

### 16. PROF.SSA MORAZZONI FRANCA

#### Argomenti di tesi:

- 1) Caratterizzazione di ioni metallici e radicali inorganici nei tessuti. Lo studio è mirato alla verifica su sistemi viventi dei processi metabolici ipotizzati in sistemi modello. I processi sono scelti in relazione alla possibilità di applicazione dei risultati a settori di prioritario interesse bio-medico-farmacologico.
- 2) Caratterizzazione elettronica di sistemi a metallo disperso su ossidi semiconduttori. Lo studio è mirato alla comprensione dei fenomeni responsabili del funzionamento dei dispositivi a stato solido per la rivelazione di CO, NO, H<sub>2</sub>. (Nell'ambito della Scuola di Specializzazione in Scienza e Tecnologia dei Materiali).

### 17. PROF. PASINI ALESSANDRO

#### Argomenti di tesi:

- 1) Studio sul meccanismo d'azione dell'attività antitumorale del CisPlatino e sintesi di suoi analoghi.
- 2) Ossidazione di substrati organici promossa da complessi metallici.
- 3) Reattività di leganti coordinati a ioni metallici, in particolare Nitrili e Ammine.

- 4) Sistemi binucleari di Sodio ed Iridio. (Per Chimici e Chimici Industriali).

### 18. PROF. ROSSI MICHELE, DR. PRATI LAURA

#### Argomenti di tesi:

- 1) Preparazione e test di valutazione di catalizzatori eterogenei per reazioni di applicazione industriale.
- 2) Metodologie catalitiche per la trasformazione ed il recupero di residui tossici e nocivi.
- 3) Attivazione dell'ossigeno molecolare sulla superficie del rame. Studio di reazioni di ossidazione, ossigenazione ed ossidrilizzazione di molecole organiche.

### 19. PROF. SARTORELLI UGO, PROF. SECONDO MARTINENGO, PROF. GARLASCHELLI LUIGI, DR. DELLA PERGOLA ROBERTO, DR. FUMAGALLI ALESSANDRO

#### Argomenti di tesi:

- 1) Sintesi e caratterizzazione di clusters carbonilici, omo ed eterometallici dei metalli di transizione.
- 2) Reazioni dell'ossido di carbonio catalizzate da carbonilanioni dei metalli dell'ottavo gruppo.
- 3) Sintesi di clusters ad alta nuclearità e studio delle relazioni con le fasi dello stato solido.

Note: Durante il periodo di Tesi lo studente apprenderà le tecniche di manipolazione, in atmosfera inerte, di composti sensibili all'aria. Acquisirà familiarità con tecniche spettroscopiche: I.R.; N.M.R. multinucleare Mössbauer e, in collaborazione con l'Istituto di Chimica Strutturistica Inorganica, di Diffrazione dei Raggi X.

### 20. PROF. UGO RENATO, DR. PSARO RINALDO, DR. DOSSI CARLO

#### Argomenti di tesi:

- 1) Chimica di superficie di clusters carbonilici supportati su ossidi inorganici o carbone.
- 2) Catalisi eterogenea con clusters metallici supportati su ossidi inorganici.
- 3) Sintesi organometalliche mediate dalla superficie della silice.

- 4) Catalisi omogenea con sali di palladio.
- 5) Composti organometallici come precursori di materiali ceramici.

**21. PROF. ZANDERIGHI GIAN MARIA,  
PROF. FUSI ACHILLE, DR. PSARO RINALDO**

**Argomenti di tesi:**

- 1) Chimica organometallica di superficie originata da decomposizione di clusters metallocarbonili su ossidi inorganici ( $\text{SiO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{ZrO}_2$ , ecc.).
- 2) Sintesi e caratterizzazione di composti modello di speci organometalliche di superficie.
- 3) Catalisi clusters metallocarbonilici supportati su ossidi (riduzioni selettive) (solo per Chimici Industriali).

**DIPARTIMENTO DI CHIMICA FISICA ED  
ELETTROCHIMICA**

<i>Proponente</i>	<i>Argomento N°</i>
Prof.ssa ARDIZZONE	1
Dr. BARZAGHI	10
Prof. BELLOBONO	4
Prof. BELTRAME Paolo	3
Prof. BELTRAME Pier Luigi	3-4-26
Prof. CARNITI	3-4
Dr.ssa CATTANIA	10
Prof. CATTI	5
Dr.ssa DAGHETTI	24
Prof. DESTRO	6-11
Prof. FIORI	7
Dr. FOIS	10
Prof. FORMARO	8
Prof. FORNI	9
Prof. GAMBA	10
Prof. GAVEZZOTTI	11
Prof. LONGHI	12
Prof. MARI	13
Prof. MAZZA	14
Prof. MOROSI	10-15
Prof. MUSSINI	16
Dr. NARDUCCI	19
Prof. OLIVA	17-27
Prof.ssa PAGLIA	26
Prof. PITEA	18
Prof. PIZZINI	19
Prof. RAGAINI	20
Prof.ssa RONDININI	21
Dr.ssa SELLI	2-27
Prof. SIVIERI	22
Prof. TANTARDINI	23
Dr. TODESCHINI	24
Prof. TRASATTI	25

### 1. PROF.SSA ARDIZZONE SILVIA

#### Argomenti di tesi:

- 1) Studio del comportamento di interfase di ossidi metallici in contatto con soluzioni acquose di elettroliti (comportamento di interfase reversibile, relazioni con caratteristiche strutturali e difettive di ossidi).
- 2) Studio della modellistica relativa ad interfasi elettrificate e simulazione numerica dell'andamento dei parametri rilevanti del sistema.
- 3) Studio di processi di adsorbimento-desorbimento di ioni su sospensioni colloidali di ossidi metallici (studio termodinamico e cinetico).

### 2. PROF. BELLOBONO RENATO, DR.SSA SELLI ELENA

#### Argomenti di tesi:

- 1) Studi cinetici sulla fotochimica di composti aromatici benzilidenderivati.
- 2) Studi cinetici del fotoinnesto e della fotopolimerizzazione di monomeri acrilici ed allilici mediante tecniche EPR, ENDOR/ESCA (in collaborazione con il Prof. C. Oliva).
- 3) Interazione fra rappresentazione teorica e approccio sperimentale nella formulazione di modelli matematici per la valutazione dell'impatto fisico nelle problematiche di inquinamento ambientale.
- 4) Applicazione a problematiche ambientali di processi di adsorbimento sui colloidali. Studio dei fenomeni interfasci (in collaborazione con il C.C.R. - Euratom di Ispra).
- 5) Immobilizzazione di enzimi in membrane fotosintetiche (bioreattori sperimentali/modellistica).
- 6) Proprietà chimico-fisiche di sorbenti e catalizzatori in membrane polimeriche fotosintetiche (esempio: trasporto facilitato di ossigeno per separazione  $O_2/N_2$ ).
- 7) Metodiche radiochimiche e radioanalitiche per la determinazione di purezza di radioisotopi prodotti in ciclotrone (in collaborazione con il laboratorio Ciclotrone del Dipartimento di Fisica).

### 3. PROF. BELTRAME PAOLO, PROF. PIER LUIGI BELTRAME, PROF. CARNITI PAOLO

#### Argomenti di tesi:

- 1) Studio di alchilazioni in fase gas/solido, su catalizzatori zeolitici.

Note: Tesi accette per studenti del C.L. in Chimica Industriale.

### 4. PROF. BELTRAME PIER LUIGI, PROF. CARNITI PAOLO

#### Argomenti di tesi:

- 1) Studio dell'idrolisi acida ed enzimatica di polisaccaridi naturali.
- 2) Studio della degradazione termica e catalitica di polimeri sintetici.
- 3) Studio della degradazione termica della materia organica contenuta nei sedimenti per la messa a punto di modelli cinetici di formazione del petrolio.

Note: lavori condotti con reattori continui e discontinui da laboratorio, in condizioni cinetiche.

### 5. PROF. CATTI MICHELE

#### Argomenti di tesi:

- 1) Simulazione al computer di proprietà strutturali, elastiche e vibrazionali in cristalli ionici e molecolari.
- 2) Calcolo di mappe di energia potenziale in solidi conduttori protonici, e studio del cammino di mobilità dello ione  $H^+$ .
- 3) Preparazione e caratterizzazione termica e strutturale di superconduttori ceramici della nuova generazione.

### 6. PROF. DESTRO RICCARDO

#### Argomenti di tesi:

- 1) Determinazione di proprietà elettrostatiche (densità elettronica, potenziale elettrostatico, gradiente di campo elettrico) in cristalli molecolari da misure di diffrazione di raggi x.
- 2) Studio della dipendenza della temperatura (nel campo 15-300 K) di fenomeni dinamici in solidi cristallini (equilibri conformazionali, trasferimento di protoni, trasformazioni di fase).

## 7. PROF. FIORI GIORGIO

### Argomenti di tesi:

- 1) Sintesi organica per via elettrochimica (solo per Chimici Industriali).

## 8. PROF. FORMARO LEONARDO

### Argomenti di tesi:

- 1) Studio del meccanismo di formazione e del comportamento elettrochimico di film di ossidi supportati (stabilità, defettività, processi di adsorbimento ionico). Elettrodi modificati.
- 2) Studio di processi di formazione di ossidi monodispersi da soluzioni acquose (colloidi per usi pigmentari, ausiliari, ceramici).
- 3) Studio del comportamento di interfase di sistemi ossido-soluzione (adsorbimento, adesione, coagulazione).

## 9. PROF. LUCIO FORNI

### Argomenti di tesi:

- 1) Studio dell'adsorbimento-diffusione di molecole-sonda in zeoliti.
- 2) Preparazione e caratterizzazione di catalizzatori zeolitici.
- 3) Studio cinetico della gassificazione di carbone.

## 10. PROF. GAMBA ALDO, PROF. MOROSI GABRIELE, DR. BARZAGHI MARIO, DR. FOIS ETTORE

### Argomenti di tesi:

- 1) Proprietà termodinamiche di liquidi e soluzione mediante metodi statistici.
- 2) Studio di proprietà strutturali e dinamiche di zeoliti naturali e artificiali mediante la dinamica molecolare.
- 3) Applicazione delle spettroscopie ESR ed ENDOR allo studio del meccanismo di reazioni organiche e della struttura e proprietà dinamiche di radicali in soluzione.
- 4) Studio teorico e sperimentale del chemical shift di eteroatomi (in collaborazione con il prof. G. Pagani).

Note: Gli argomenti 1 e 2 sono di natura teorica, il 3 è sperimentale, il 4 è teorico/sperimentale.

## 11. PROF. GAVEZZOTTI ANGELO

### Argomenti di tesi:

- 1) Struttura e proprietà di solidi e cristalli organici molecolari.

Note: Per studenti di Chimica, Chimica Industriale, Fisica, CTF.

## 12. PROF. PAOLO LONGHI

### Argomenti di tesi:

- 1) Termodinamica elettrodica.
- 2) Termodinamica delle soluzioni acquose, non acquose e miste.
- 3) Elettrodi ionoselettivi.

## 13. PROF. MARI CLAUDIO MARIA

### Argomenti di tesi:

- 1) Studio e caratterizzazione delle proprietà elettriche e strutturali di elettroliti solidi protonici.
- 2) Studio delle proprietà elettriche di super conduttori ad elevata temperatura.
- 3) Studio e realizzazione di dispositivi elettrochimici allo stato solido per la determinazione dell'attività di specie gassose ( $\text{Cl}_2$ ,  $\text{NO}_x$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{SO}_x$ ,  $\text{H}_2$ ).

## 14. PROF. MAZZA FRANCESCO

### Argomenti di tesi:

- 1) Tenso corrosione ed infrangimento di idrogeno di leghe per scambio termico.
- 2) Monitoraggio di processi di corrosione.
- 3) Influenza di elementi leganti nella corrosione di leghe di rame.

## 15. PROF. MOROSI GABRIELE

### Argomenti di tesi:

- 1) Applicazione di calcolatori paralleli in Chimica Teorica.
- 2) Studio dell'effetto solvente mediante simulazioni.

## 16. PROF. MUSSINI TORQUATO

### Argomenti di tesi:

- 1) Equilibri in soluzioni non acquose o miste.
- 2) Elettrodi di misura e di riferimento non convenzionali.
- 3) Membrane e sensori ionoselettivi e chemioselettivi.
- 4) Standards pH-metrici e p ionometrici in solventi non acquosi o misti.
- 5) Solvatazione ionica e processi di trasporto.

## 17. PROF. OLIVA CESARE

### Argomenti di tesi:

- 1) Caratterizzazione di difetti puntiformi in SiO<sub>2</sub> cristallino ed amorfo con tecniche EPR/ENDOR.
- 2) Studi di suscettività magnetica, di risonanza di spin elettronico e di spettroscopia ENDOR su cluster carbonilici molecolari, modelli di superfici metalliche (in collaborazione con Prof. F. Morazzoni) (Solo per Chimici).

#### Note:

Lo studio è finalizzato alla conoscenza dei difetti che hanno un ruolo nelle proprietà di trasporto elettrico delle strutture MOS (metallo-ossido-semiconduttore) e di assorbimento ottico nelle fibre ottiche. (In collaborazione con il Dipartimento di Fisica e nell'ambito delle tematiche della Scuola di Specializzazione in Scienza e Tecnologia dei Materiali).

## 18. PROF. PITEA DEMETRIO

### Argomenti di tesi:

- 1) Studio delle relazioni tra la struttura molecolare e l'attività biologica mediante metodi teorici di modellistica molecolare e metodi sperimentali.
- 2) Sviluppo di sistemi esperti per la modellistica chimica.
- 3) Studio della reattività nelle reazioni di Diels-Alder e nelle 1,3-dipolari.
- 4) Studio dei meccanismi di formazione/distruzione di microinquinanti organoclorurati nelle reazioni di pirolisi/combustione di singoli composti o materiali (su scala di laboratorio) e nei processi di combustione (su scala pilota e industriale).
- 5) Valutazione di impatto ambientale di processi industriali.

## 19. PROF. PIZZINI SERGIO, DR. NARDUCCI DARIO

### Argomenti di tesi:

- 1) Semiconduttori cristallini: studio dei difetti mediante tecniche elettriche e spettroscopiche.

- 2) Semiconduttori inorganici ed organici: studio delle proprietà di superficie in vista di una loro utilizzazione come sensori.
- 3) Crescita di cristalli per applicazioni ortoelettroniche mediante la tecnica Bridgman.

## 20. PROF. RAGAINI VITTORIO, DR.SSA CATTANIA M. GRAZIA

### Argomenti di tesi:

- 1) Caratterizzazione di catalizzatori metallici supportati mediante desorbimento termico in ultra alto vuoto.

## 21. PROF.SSA RONDININI SANDRA

### Argomenti di tesi:

- 1) Processi a membrana. proprietà di scambio e di trasporto di membrane cariche artificiali per uso industriale (Solo per Chimici).
- 2) Termodinamica degli elettrodi di riferimento.
- 3) Termodinamica delle soluzioni elettrolitiche in solventi acquosi, non acquosi e misti.
- 4) Elettrosintesi organiche.

## 22. PROF. SIVIERI ENRICO

### Argomenti di tesi:

- 1) Fenomeni di corrosione ad alta temperatura di leghe metalliche sotto deposito di sali fusi.
- 2) Problemi di corrosione negli impianti per la produzione di energia.
- 3) Monitoraggio dei processi di corrosione ad alta temperatura.

## 23. PROF. TANTARDINI GIAN FRANCO

### Argomenti di tesi:

- 1) Studio teorico della dinamica di adsorbimento di molecole semplici su superfici metalliche.

- 2) Studio teorico del potenziale di interazione tra molecole in fase gassosa e superfici metalliche.

#### 24. DR. TODESCHINI ROBERTO

##### Argomenti di tesi:

- 1) Analisi conformazionale con metodi semi-empirici quantistici e classici a molecole di interesse organico.
- 2) Applicazioni di tecniche chemometriche a problemi di interesse chimico-fisico e biochimico.

#### 25. PROF. TRASATTI SERGIO, DR.SSA DAGHETTI ANNA

##### Argomenti di tesi:

- 1) Studio dell'interfase ossido/soluzione elettrolitica.
- 2) Caratterizzazione elettrochimica di materiali elettrodici per impieghi tecnologici (per soli Chimici Industriali).
- 3) Termodinamica di adsorbimento di sostanze organiche su elettrodi (per soli chimici).
- 4) Studio dell'influenza dell'orientazione cristallina sul comportamento elettrochimico. (Per soli Chimici)

#### 26. PROF. BELTRAME PIERLUIGI, PROF.SSA PAGLIA DUBINI ERNESTINA

##### Argomenti di tesi:

- 1) Fotocromismo di azocoloranti in matrici polimeriche.
- 2) Effetti catalitici sulle reazioni fotocromiche.

#### 27. DR. SELLI ELENA, PROF. OLIVA CESARE

##### Argomenti di tesi:

- 1) Decadimento di radicali generati nella fotopolimerizzazione di diacrilati. Studio cinetico e meccanicistico mediante tecniche EPR/ENDOR.

### DIPARTIMENTO DI CHIMICA ORGANICA E INDUSTRIALE

<i>Proponente</i>	<i>Argomento N°</i>
Dr. ANELLI	14
Prof.ssa ANNUNZIATA	1
Dr.ssa BALDOLI	11
Dr. BANFI	14
Dr.ssa BERETTA	24
Dr.ssa BERLIN	16
Dr.ssa BERNASCONI	10
Dr.ssa BRADAMANTE	15
Prof. CINQUINI	1
Prof. COLONNA	2
Dr. COZZI	1
Prof. DALLA CROCE	3
Prof. DANIELI	4
Prof.ssa DEL BUTTERO	11
Prof. DI SILVESTRO	5
Prof. FARINA	5
Dr.ssa FERRACCIOLI	3
Dr.ssa FERRARI	10
Prof.ssa GARANTI	6
Prof. GENNARI	7
Prof.ssa GRAMATICA	8
Prof. LANDINI	9
Dr. LESMA	4
Dr. LICANDRO	11
Prof. JOMMI	10
Dr.ssa MAIA	9
Prof. MAIORANA	11
Dr.ssa MANFREDI	2
Prof. MANITTO	12-13
Dr. MONTI	12
Prof. MONTANARI	14
Prof. NICOTRA	22
Prof.ssa ORSINI	18
Prof. PAGANI	15-16
Dr. PAGLIARIN	10
Prof. PALMISANO	17
Prof.ssa PELIZZONI	18
Dr. PENSO	9
Dr. POTENZA	24
Dr. QUICI	14
Dr.ssa L. RAIMONDI	1
Prof.ssa RANZI	13-19



Prof.ssa	RICCA	20
Prof.	RINDONE	21
Prof.	RUSSO	22
Prof.	SANNICOLÒ	23
Prof.	SCOLASTICO	24
Dr.	SELLO	18
Dr.	SISTI	10
Dr.	SOZZANI	5
Dr.ssa	SPERANZA	12
Prof.	ZECCHI	25

**1. PROF. CINQUINI MAURO, PROF. COZZI FRANCO,  
PROF.SSA RITA ANNUNZIATA, DR.SSA RAIMONDI LAURA**

**Argomenti di tesi:**

- 1) Cicloaddizioni 1,3 dipolari stereocontrollate e loro applicazioni sintetiche.
- 2) Razionalizzazione del decorso stereochimico di reazioni stereoselettive.
- 3) Sintesi stereoselettive mediante derivati solforati.
- 4) Composti organometallici di titanio e vanadio in sintesi stereoselettive, mediante l'applicazione di metodi teorici.

**2. PROF. COLONNA STEFANO,  
DR.SSA MANFREDI AMEDEA**

**Argomenti di tesi:**

- 1) Sintesi asimmetriche in condizioni biomimetiche.
- 2) Reazioni stereoselettive catalizzate da enzimi di ossido-riduzione.
- 3) Modelli sintetici di enzimi.

**3. PROF. DALLA CROCE PIERO**

**Argomenti di tesi:**

- 1) Sintesi e reattività di sistemi eterociclici
- 2) Reazioni di cicloaddizioni.

**4. PROF. DANIELI BRUNO, DR. LESMA GIORDANO**

**Argomenti di tesi:**

- 1) Preparazione di sintomi chirali per via enzimatica e loro utilizzo nella enantiosintesi di prodotti naturali.
- 2) Sintesi totali stereoselettive di alcaloidi indolici.
- 3) Acilazioni regiospecifiche di glicosidi catalizzate da enzimi.

**5. PROF. FARINA MARIO, PROF. DI SILVESTRO GIUSEPPE,  
DR. SOZZANI PIERO**

**Argomenti di tesi:**

- 1) Stereochimica organica e macromolecolare.
- 2) Caratterizzazione strutturale e molecolare di polimeri.

- 3) Polimerizzazione allo stato solido e in soluzione.
- 4) Diagrammi di fase e struttura di addotti cristallini.

**Note:** Per ciascun argomento è possibile assegnare più di una tesi. Gli argomenti sono validi per entrambi i corsi di laurea.

## 6. PROF.SSA GARANTI LUISA

### Argomenti di tesi:

- 1) Studio di nuove vie di sintesi di sistemi eterociclici. Verranno studiate reazioni di cicloaddizione 1,3 dipolari e di ciclocondensazione focalizzando lo studio sui requisiti strutturali che determinano originali cammini di reazione. I prodotti sintetizzati presentano potenziale interesse applicativo quali farmaci, fitofarmaci e additivi.

## 7. PROF. GENNARI CESARE

### Argomenti di tesi:

- 1) Nuovi metodi di sintesi asimmetrica mediante l'uso di ausiliari chirali: applicazioni alla sintesi di composti biologicamente attivi.
- 2) "Enzyme mimicking": nuovi sistemi per la sintesi biomimetica di polipeptidi.
- 3) "Computer modeling": studio col computer delle strutture di transizione di condensazioni aldoliche e altre reazioni stereoselettive.
- 4) "Chimica organometallica": complessi di boro e di titanio e del molibdeno nella sintesi asimmetrica.

## 8. DR. GRAMATICA PAOLA

### Argomenti di tesi:

- 1) Studio di biotrasformazioni con lievito, altri microorganismi o enzimi: applicazioni alla sintesi di prodotti naturali chirali.
- 2) Isolamento e determinazione della struttura di prodotti naturali di origine vegetale.

## 9. PROF. LANDINI MARIO, DR.SSA MAIA ANGELA MARIA, DR. PENSO MICHELE

### Argomenti di tesi:

- 1) Nuove metodologie di sintesi: applicazioni della catalisi per trasferimento di fase alla sintesi organica.

- 2) Attivazioni anionica in sistemi bifasici acquoso-organici e in mezzi omogenei poco polari.
- 3) Studio dei meccanismi di reazioni organiche promosse da anioni in sistemi bifasici acquoso-organici.

## 10. PROF. JOMMI GIANCARLO, DR.SSA BERNASCONI SILVANA, DR.SSA FERRARI MARINELLA, DR. SISTI MASSIMO, DR. PAGLIALIN ROBERTO

### Argomenti di tesi:

- 1) Sintesi totali di sostanze biologicamente attive (solo per chimici).
- 2) Metodologie di sintesi in Chimica Organica.
- 3) Computer Chemistry.
- 4) Analisi e determinazione della struttura di sostanze biologicamente attive.
- 5) Applicazione di reazioni enzimatiche alla sintesi originale.

## 11. PROF. MAIORANA STEFANO, DR.SSA BALDOLI CLARA, PROF.SSA DEL BUTTERO PAOLA, DR.SSA LICANDRO EMANUELA

### Argomenti di tesi:

- 1) Nuove metodologie di sintesi di composti organici.
- 2) Impiego di composti organometallici nella sintesi organica.
  - a. Sintesi e reattività di nuovi composti organometallici.
  - b. Sintesi di composti organici (eterociclici e non) biologicamente attivi.
  - c. Sintesi asimmetrica mediante ausiliari chirali organometallici.

## 12. PROF. MANITTO PAOLO, DR. MONTI DIEGO, DR.SSA SPERANZA GIOVANNA

### Argomenti di tesi:

- 1) Sintesi asimmetrica: sintesi chemoenzimatiche ed enantioselettive di prodotti naturali.
- 2) Reazioni enzimatiche: determinazione della criptostereochimica di idrogenazioni di doppi legami alilici ad opera di ossidoreduttasi dei lieviti.
- 3) Sostanze naturali: studi strutturali e conformazionali di molecole di interesse alimentare.

- 4) Chimica bioorganica: reazioni tra forme attivate dell'ossigeno (ossigeno singolo, ione superossido, ecc.) e molecole biologicamente attive: studio degli effetti fotodinamici in vivo mediante sistemi modello.

**Note:** Il lavoro 2) comprende la sintesi di molecole opportunamente marcate con isotopi stabili ( $^2\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ) e l'impiego di tecniche spettroscopiche (NMR, MS) per la determinazione della sostituzione isotopica.

### 13. PROF. MANITTO PAOLO, PROF.SSA B.MARIA RANZI

#### Argomenti di tesi:

- 1) Caratterizzazione di cellule ed enzimi ottenuti con tecniche di DNA ricombinante (solo per Chimici).
- 2) Produzione di proteine da una ricombinazione in diversi tipi di fermentatori (solo per Chimici).
- 3) Monitoraggio e controllo di produzione di biomasse e di metaboliti mediante l'uso di parametri segregati.

### 14. PROF. MONTANARI FERNANDO, DR. ANELLI LUCIO, DR. BANFI STEFANO, DR. QUICI SILVIO

#### Argomenti di tesi:

Reazioni di epossidazione di alcheni e idrossilazioni di alcani catalizzate da metallo-tetraetil porfirine: studi cinetici, indagini strutturali, applicazioni.

- 2) Sintesi di metallo-porfirine altamente funzionalizzate: catalizzatori biomimetici in reazioni di ossigenazione.
- 3) Metallo porfirine chirali quali catalizzatori in reazioni enantioselettive.
- 4) Sintesi, complessazione e attività catalitica di leganti poli-ossa, poli-aza macrociclici, anche immobilizzati su matrici polimerica.

### 15. PROF. PAGANI GIORGIO, DR.SSA BRADAMANTE SILVIA

#### Argomenti di tesi:

- 1) Monitoraggio NMR ( $^1\text{H}$ ,  $^{31}\text{P}$ ,  $^{13}\text{C}$ ) di ossidazioni radicaliche in sistemi biologici.

- 2) Analisi NMR di fluidi biologici.

### 16. PROF. PAGANI GIORGIO, DR.SSA BERLIN ANNA

#### Argomenti di tesi:

- 1) Sintesi, funzionalizzazione e caratterizzazione di materiali organici anche polimerici (generalmente a base eterociclica) atti a diventare conduttori elettrici per drogaggio chimico o elettrochimico.

#### Nota:

Il lavoro sperimentale comprende stadi di sintesi organica del prodotto, sua caratterizzazione spettroscopica seguita da preparazioni (anche elettrochimica) del materiale e sua caratterizzazione chimica ed elettrica.

### 17. PROF. PALMISANO GIOVANNI

#### Argomenti di tesi:

- 1) Sintesi di composti naturali con particolare riferimento ad alcaloidi (sintesi enantioselettiva, trasformazioni di scheletro, correlazioni strutturali) (solo per Chimici).
- 2) Sintesi di sintoni chirali a partire da monoterpene otticamente attivi e largamente disponibili (solo per Chimici).
- 3) Sintesi elettrochimica organica.

### 18. PROF.SSA PELIZZONI FRANCESCA, PROF.SSA ORSINI FULVIA, DR. SELLO GUIDO

#### Argomenti di tesi:

- 1) Isolamento e determinazione di struttura di nuovi prodotti naturali.
- 2) Sintesi mediante reazioni biocatalizzate (microorganismi, enzimi) (solo per Chimici).
- 3) Organocinco ed azadieni in sintesi organica. Nuove applicazioni e studi meccanicistici.
- 4) Programmazione sintetica e previsione di reattività assistite da elaboratore (solo per Chimici).

## 19. PROF.SSA B. MARIA RANZI

### Argomenti di tesi:

- 1) Monitoraggio e controllo di coltura continua e di fed-batch di lieviti.
- 2) Produzione di enzimi da DNA ricombinante con diversi ceppi di lieviti.

## 20. PROF.SSA RICCA GIULIANA

### Argomenti di tesi:

- 1) Studio mediante spettroscopia NMR e IR-FT di molecole organiche con struttura analoga agli acidi fulvici e del loro potere complessante verso ioni metallici.
- 2) Determinazioni strutturali di acidi fulvici e acidi umici. Caratterizzazione chimica e spettroscopica NMR (1-H, 13-C, 31-P, 15-N) e MS.
- 3) Studi di spettroscopia NMR [1-H, 13-C, (17-O in particolare)] di composti ossigenati modelli di sistemi di interesse biologico.

## 21. PROF. RINDONE BRUNO

### Argomenti di tesi:

- 1) Correlazioni struttura-reattività nella sintesi organica ottenuta attraverso catalisi omogenea effettuata da sistemi organometallici. Ossidazione, riduzione, carbonilazione ossidativa, carbonilazione riduttiva.
- 2) Metodologie analitiche e studi di reattività applicata alla chimica della depurazione, dell'incenerimento, dell'atmosfera.
- 3) Sintesi e purificazione di molecole capaci di interagire con il sistema immunocompetente: sonde molecolari, anticorpi catalitici, riconoscimenti attraverso anticorpi monoclonali.
- 4) Sintesi di farmaci neurotropi e di loro derivati biodisponibili in relazione alla struttura della neuromelanina ed al suo ruolo nel morbo di Parkinson.
- 5) Sintesi diastereo- ed enantioselettiva di modelli di lignina mediante enzimi e sistemi biomimetici.

## 22. PROF. RUSSO GIOVANNI, PROF. NICOTRA FRANCESCO

### Argomenti di tesi:

- 1) Sintesi di Carboidrati di interesse biologico.
- 2) Sintesi di inibitori di sistemi enzimatici.

- 3) Ricerca di nuovi metodi chimici e biotecnologici per la sintesi di carboidrati complessi.

## 23. PROF. SANNICOLÒ FRANCESCO

### Argomenti di tesi:

- 1) *Composti eterociclici*: sintesi di nuovi sistemi eterociclici e sintesi non convenzionali di composti eterociclici (solo per Chimici).
- 2) *Reazioni di trasposizione*: studio di nuove reazioni di trasposizione accompagnate da rottura del legame N-N (solo per Chimici).
- 3) *Materiali*: sintesi e caratterizzazioni di composti organici a base eterociclica con proprietà di conduzione elettrica.
- 4) *Stereochimica organica*: sintesi e proprietà di sistemi a chiralità assiale e planare eterociclici (solo per Chimici).

## 24. PROF. SCOLASTICO CARLO, DR.SSA BERETTA M. GRAZIA, DR.SSA POTENZA DONATELLA

### Argomenti di tesi:

- 1) Nuovi metodi di sintesi - Sintesi di composti biologicamente attivi.
- 2) Sintesi asimmetrica mediante ausiliari chirali derivati dall'efedrina.
- 3) Correlazioni struttura-attività e binding di farmaci mediante modelli teorici e computer graphics.
- 4) Analisi e struttura di peptidi e glicopeptidi farmacologicamente attivi.

## 25. PROF. ZECCHI GAETANO

### Argomenti di tesi:

- 1) Cicloaddizioni 1,3-dipolari intermolecolari e intramolecolari: aspetti meccanicistici e applicazioni sintetiche.
- 2) Sintesi e reattività di composti eterociclici.

## 26. DR. HENRIETTE MOLINARI

### Argomento di tesi:

- 1) Studi di Risonanza Magnetica Nucleare di composti di interesse biologico.