

### **AVVERTENZA**

I dati riportati in questa edizione 1998-99 del Libretto sono aggiornati al Luglio 1998 e si riferiscono al Nuovo Ordinamento dei Corsi di Laurea in Chimica e in Chimica Industriale e all'attivazione del Diploma Universitario In Chimica.

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

Milano, Luglio 1998

LA SEGRETERIA DIDATTICA

## INDICE

### **CORSO DI DIPLOMA UNIVERSITARIO IN CHIMICA**

*Manifesto Studi a.a. 98/99*  
Presentazione  
Ordinamento didattico  
Indirizzi  
Corsi di Laurea affini – riconoscimenti  
Informazioni didattiche

### **CORSO DI LAUREA IN CHIMICA**

*Manifesto Studi a. a.a. 98/99*  
Informazioni generali  
Note illustrative del Corso di Laurea in Chimica  
*Regolamento per lo svolgimento della tesi di laurea in Chimica*  
*Programmi degli insegnamenti*  
*Consiglio e Segreteria del corso di laurea in Chimica*  
*Elenco dei corsi e dei docenti*

### **CORSO DI LAUREA IN CHIMICA INDUSTRIALE**

*Manifesto Studi a.a. 98-99*  
Informazioni generali  
Note illustrative del Corso di Laurea in Chimica Industriale  
*Regolamento per lo svolgimento della tesi di laurea*  
*Programmi degli insegnamenti*  
*Consiglio e Segreteria del corso di Laurea in Chimica Industriale*  
*Elenco dei Corsi e Docenti*  
*Indirizzi dei dipartimenti e degli istituti sedi dei docenti dei Corsi di Laurea in Chimica e in Chimica industriale*

### **ELENCO ARGOMENTI DI TESI DISPONIBILI PRESSO:**

Dipartimento di Chimica Strutturale e Stereochimica Inorganica  
Dipartimento di Chimica Inorganica, Metallorganica e Analitica  
Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica  
Dipartimento di Chimica Organica ed Industriale  
Dipartimento di Scienze dei Materiali  
Dipartimento di Scienze dell' Ambiente e del Territorio

### **NOTE INFORMATIVE ISU**

**CORSO DI DIPLOMA  
UNIVERSITARIO IN CHIMICA  
(F37)**

## MANIFESTO DEGLI STUDI A.A. 1998/99

### Note Illustrative

#### PRESENTAZIONE

Dall'a.a. 1998/99 è istituito presso la Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali il corso di DIPLOMA UNIVERSITARIO IN CHIMICA.

Il Corso di Diploma in Chimica ha lo scopo di fornire agli studenti un'adeguata conoscenza dei metodi e dei contenuti culturali e scientifici, orientata alla formazione di esperti in:

- Analisi e controllo dei prodotti e dei materiali
- Sintesi chimica (organica e inorganica)

Al termine degli studi gli studenti conseguiranno il titolo di Diploma Universitario in Chimica.

Il Corso di Diploma Universitario in Chimica avrà la durata di 3 anni, articolata in un Biennio di Formazione di Base e in un Anno di Formazione Professionalizzante e in tre periodi di Tirocinio. Ogni anno di corso è suddiviso in due semestri. Il Biennio comporta la frequenza e il superamento di 16 annualità, l'Anno di Formazione comporta la frequenza e il superamento di 6 annualità, scelte tra i corsi di due Indirizzi: Analisi e Controllo dei Prodotti e dei Materiali e Sintesi Chimica (orientamenti: Chimica Organica e Chimica Inorganica) e l'attività di Tirocinio.

L'attività didattica si svolgerà presso la sede del Corso di Laurea in Chimica (via Venezian, 21), mutuando vari corsi da quelli attivati presso il Corso di Laurea in Chimica.

Il Corso di Diploma verrà presentato agli studenti in un incontro, 4 settembre 1998, ore 15, presso il Settore Didattico di via Celoria, 20, aula 206.

L'ammissione al Corso di Diploma è programmato annualmente dal Senato Accademico su proposta della Facoltà. Per l'a.a. 1998/99 i posti a disposizione sono complessivamente **26**, pertanto è necessaria una pre-iscrizione e una successiva prova di ammissione prima dell'iscrizione.

**Le pre-Iscrizioni** al Corso di Diploma devono essere effettuate nel periodo **3 agosto- 8 settembre 1998** su apposito modulo presso le Segreterie Studenti di via Celoria, 20.

**L'ammissione al Corso di Diploma è condizionata al superamento di una prova scritta.**

La prova consisterà in un test a risposta multipla tesa ad accertare: le capacità logiche, conoscenze di chimica, fisica, matematica e biologia.

Il 70% dei punti sarà attribuito in base all'esito della prova, il restante 30% dal voto di diploma di maturità.

**La prova si terrà presso l'aula 301 del Settore Didattico di via Celoria, 20 il giorno 14 settembre 1998, con inizio ore 15.** I candidati dovranno presentarsi alle prove muniti di un idoneo documento di riconoscimento.

Saranno ammessi al Corso di Diploma Universitario in Chimica i candidati che, in relazione al numero dei posti disponibili, si saranno collocati in posizione utile in graduatoria sulla base del punteggio riportato. La graduatoria sarà esposta il giorno 16 settembre 1998 nell'atrio di via Venezian 21.

Le iscrizioni al Corso di Diploma agli studenti ammessi dovranno essere presentate e completate entro e non oltre il 30 settembre 1998.

## ORDINAMENTO DIDATTICO

<b>Biennio di Formazione di Base</b>
--------------------------------------

### Annualità Obbligatorie (16)

#### **PRIMO ANNO**

F37001 Istituzioni di Matematiche I  
F37002 Chimica Generale e Inorganica  
F37003 Laboratorio di Chimica Generale e Inorganica  
F37004 Chimica Organica I  
F37005 Laboratorio di Chimica Organica I  
F37006 Istituzioni di Matematiche II  
F37007 Fisica Generale I  
F37008 Laboratorio di Fisica Generale II

#### **SECONDO ANNO**

F37009 Chimica Analitica I  
F37010 Laboratorio di Chimica Analitica I  
F37011 Laboratorio di Chimica Fisica I  
F37012 Chimica Fisica I  
F37013 Chimica Organica II  
F37014 Laboratorio di Chimica Inorganica I  
F37015 Laboratorio di Chimica Analitica II  
F37016 Laboratorio di Chimica Fisica II

<b>Anno di Formazione Professionalizzante</b>
---

#### **TERZO ANNO**

All'atto dell'iscrizione al terzo anno di corso, gli studenti dovranno scegliere un Indirizzo tra i due attivati: Analisi e Controllo dei Prodotti e dei Materiali e Sintesi Chimica (con due orientamenti: Chimica organica e Chimica Inorganica) e 6 annualità tra gli insegnamenti attivati nei rispettivi Indirizzi.

Le 6 annualità dovranno essere scelte seguendo il seguente schema:

*Scelta indirizzo*  
*Annualità Professionalizzanti e Indirizzi (3 annualità)*  
*Moduli integrati (1 annualità)*  
*Annualità Opzionali (1 annualità)*  
*Tirocinio (1 annualità)*

## INDIRIZZI

### Indirizzo: Analisi e Controllo dei Prodotti e dei Materiali

#### Insegnamenti Professionalizzanti (3 annualità)

F37017 Chimica Fisica dei Materiali  
F37018 Chimica Analitica dei Materiali  
F37019 Metodi Fisici in Chimica Organica

#### Moduli integrati (1 annualità)

F37025 Diritto Industriale e Organizzazione Aziendale (1/2 annualità)  
F37026 Sicurezza e Impatto Ambientale (1/2 annualità)

#### Opzionali (1 annualità a scelta tra le seguenti:)

F37027 Chimica Fisica II  
F37028 Chemiometria  
F37029 Chimica delle Macromolecole  
F37030 Elettrochimica  
F37031 Chimica Fisica dei Sistemi Dispersi e Interfasi  
F37032 Calcolo Numerico e Programmazione

#### Tirocinio (1 annualità)

Gli studenti oltre alle attività di studio legati ai corsi teorici e ai laboratori pratici, dovranno svolgere periodi di tirocinio (2 nel biennio e 1 nel terzo anno) presso qualificati Enti Pubblici e Privati, convenzionati con l'Università.

**Indirizzo: Sintesi Chimica**

Insegnamenti Professionalizzanti (3 annualità)

**Orientamento Chimica Organica**

F37019 Metodi Fisici in Chimica Organica  
Composti Metallorganici

F37020 Sintesi e Tecniche Speciali Organiche

F37021 Laboratorio di Sintesi e Tecniche

Speciali Organiche

**Moduli integrati (1 annualità)**

F37025 Diritto Industriale e Organizzazione Aziendale (1/2 annualità)

F37026 Sicurezza e Impatto Ambientale (1/2 annualità)

Annualità Opzionali (1 annualità a scelta tra le seguenti annualità:)

**Orientamento Chimica Organica**

F37029 Chimica delle Macromolecole

F37033 Tecnologie Industriali

F37034 Chimica delle Fermentazioni

e Microbiologia Industriale

F37035 Chimica dei Composti Eterociclici

F37038 Chimica Organica III

**Orientamento Chimica Inorganica**

F37022 Sintesi ed Applicazioni Catalitiche dei

F37023 Chimica Inorganica Applicata

F37024 Chimica Analitica II

**Orientamento Chimica Inorganica**

F37036 Chimica Inorganica I

F37037 Chimica dei Composti di Coordinazione

**Tirocinio (1 annualità)**

Gli studenti oltre alle attività di studio legati ai corsi teorici e ai laboratori pratici, dovranno svolgere periodi di tirocinio (2 nel biennio e 1 nel terzo anno) presso qualificati Enti Pubblici e Privati, convenzionati con l'Università.

**CORSI DI LAUREA AFFINI – RICONOSCIMENTI**

Il Diploma Universitario in Chimica è riconosciuto affine ai Corsi di Laurea in Chimica, Chimica Industriale e Scienze dei Materiali. Nell'ambito dei Corsi affini i Consigli dei Corsi di Laurea valuteranno per il riconoscimento degli insegnamenti superati con esito positivo.

**INFORMAZIONI DIDATTICHE**

- Date di inizio dei corsi: **1° semestre dal 28.9.1998 al 20.1.1999**  
(eccetto "Chimica Generale e Inorganica" e Istituzioni di Matematiche I" che iniziano il 21.9.1998)
- Orario lezioni: **2° semestre dal 1.3.1999 al 11.6.1999**  
affisso nell'atrio di via Venezian 21
- Programmi dei corsi: contenuti nel "Libretto Programmi dei Corsi di Laurea in Chimica e Chimica Industriale e del Diploma in Chimica a.a. 1998/99" di prossima pubblicazione a cura dell'ISU e in vendita presso le librerie universitarie di via Celoria, 20
- Manifesto degli Studi: in distribuzione gratuita presso le Segreterie di via Celoria, 20
- Informazioni didattiche: Segreteria Didattica Chimica di via Venezian, 21 aperta ore 10-12

Milano, luglio 1998

IL PRESIDENTE  
Prof. Francesco CARIATI

**CORSO DI LAUREA IN CHIMICA  
(F11)**



## MANIFESTO DEGLI STUDI A.A. 1998/99

### INFORMAZIONI GENERALI

**Ciclostilato e Guida dello Studente a.a. 1998/99** Le prime essenziali informazioni sull'ordinamento degli studi del Corso di Laurea in Chimica sono riportate in questo ciclostilato in distribuzione presso le Segreterie Decentrate di Via Celoria, 22.

#### Colloqui di Orientamento delle Matricole

Ulteriori informazioni saranno date dai Docenti del Corso di Laurea nei Colloqui di Orientamento delle Matricole tenuti il giorno 10 settembre 1998, ore 15, presso il Settore Didattico in via Celoria, 20.

#### Immatricolazioni

I moduli per l'immatricolazione si ritirano e si consegnano (debitamente compilati e documentati) all'UFFICIO MATRICOLA in via Festa del Perdono, 7 (orario 9.00-12.00) dal 1° agosto.

#### Date di inizio dei Corsi

1° Semestre	dal 28.9.1998	al 20.1.1999
	(Gli insegnamenti di Istituzioni di Matematiche 1° corso e Chimica Generale ed Inorganica inizieranno il giorno 21 settembre 1998).	
2° Semestre	dal 1.3.1999	al 11.6.1999

#### Orario delle Lezioni

L'orario delle lezioni per l'a.a. 1998/99 verrà affisso nell'atrio di via Venezian, 21.

#### Calendario appelli esami di profitto

Si ricorda che il Consiglio del Corso di Laurea in Chimica ha deliberato che possono essere tenuti da un minimo di 7 a un massimo di 11 appelli annui. Di seguito riportiamo la programmazione su 9 appelli annui.

Appelli d'esame per gli a.a. 1997/98 e 1998/99

A.A. 1997/98	Settembre 1998:	2 appelli	II Sessione
	Gennaio 1999:	1 appello	III Sessione
A.A. 1998/99	Febbraio 1999:	2 appelli	I Sessione
	Aprile 1999:	1 post-appello	"
	Giugno 1999:	1 appello	"
	Luglio 1999:	2 appelli	"
	Settembre 1999:	2 appelli	II Sessione
	Gennaio 2000:	1 appello	III Sessione

#### Iscrizioni agli esami, ai laboratori e presentazione dei piani di studio

L'iscrizione agli esami avviene, di norma, tramite i terminali self service del SIFA. Si ricorda agli studenti che le iscrizioni (o le cancellazioni) agli appelli d'esame chiudono, di norma, cinque giorni prima della data d'esame.

Dal 1° settembre 1998 l'iscrizione ai laboratori avverrà tramite i terminali self service del SIFA. Gli studenti verranno iscritti in unico turno per poi essere redistribuiti in occasione della data di riunione preliminare.

Il Piano di studio che gli studenti devono presentare alla fine del triennio e all'inizio del quarto anno deve essere presentato tramite i terminali self service del SIFA, di norma. Per casi particolari sarà possibile la presentazione dei piani di studio su modulo predisposto dalla Segreteria.

#### **Calendario entrate in tesi e sedute di laurea**

A.A.	<i>Entrate in tesi</i>		<i>Sedute di Laurea</i>
	<i>presentazione domande</i>	<i>ammissione in tesi</i>	<i>date</i>
1997/98	1-31 ottobre 1998 1-28 febbraio 1999	Novembre 1998 Marzo 1999	26-27-28 ottobre 98 8-9-10 marzo 99
1998/99	1-30 aprile 1999 1-30 giugno 1999 1-31 ottobre 1999 1-31 gennaio 2000	Maggio 1999 Luglio 1999 Novembre 1999 Febbraio 2000	24-25-26 maggio 99 12-13-14 luglio 99 25-26-27-28 ottobre 99 -

#### **Programmi degli Insegnamenti**

I programmi degli Insegnamenti sono riportati nel libretto "Piani di Studio e Programmi degli Insegnamenti a.a. 1998-99".

#### **Informazioni Didattiche**

Per informazioni su orari, programmi e tutto ciò che riguarda la didattica rivolgersi alla Segreteria Didattica del Corso di Laurea in Chimica (atrio via Venezian 21 - aperta tutti i giorni dalle 10 alle 12).  
Milano, Luglio 1998

## NOTE ILLUSTRATIVE

### DEL CORSO DI LAUREA IN CHIMICA

L'ordinamento del Corso di Laurea in Chimica prevede un *Triennio Propedeutico* ed un *Biennio di Applicazione*.

Per il conseguimento della Laurea in Chimica lo studente immatricolato a partire dall'a.a. 1997/98 deve superare almeno 25 esami, scelti tra quelli impartiti nell'Università degli Studi di Milano secondo le norme di seguito riportate, e la "Prova della Conoscenza della Lingua Inglese". Gli studenti immatricolati precedentemente all'a.a. 1996/97 devono invece aver sostenuto almeno 23 esami, oltre alla "Prova di Conoscenza di Lingua Inglese".

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

I Corsi di Laboratorio hanno l'esame in comune con il Corso Teorico corrispondente, con l'eccezione di Chimica, Generale ed Inorganica e Laboratorio di Chimica Generale ed Inorganica, Chimica Fisica (1° corso) e Laboratorio di Chimica Fisica (1° corso) che comportano esami e votazioni indipendenti.

### MODIFICHE AL NUOVO ORDINAMENTO

Con l'a.a. 1998/99 vengono introdotte modifiche rilevanti all'Ordinamento Didattico del Corso di laurea in Chimica, anche in relazione all'attivazione del Corso di Diploma Universitario in Chimica. Per l'a.a. 1998/99 viene attivato il Primo Anno modificato e successivamente negli a.a. a venire verranno attivati Secondo e Terzo Anno secondo lo schema seguente.

### TRIENNIO DI STUDI PROPEDEUTICI

La numerazione <> si riferisce al numero degli esami da sostenere (18 nel Triennio Propedeutico).

Dei 18 esami del Triennio solo due sono a scelta degli studenti (Opzionali del 3° anno). Tali corsi debbono essere indicati dallo studente nell'ambito della lista riportata tra gli insegnamenti del 3° anno.

Il codice abbinato ai vari insegnamenti identifica univocamente l'esame da sostenere. Corsi con lo stesso codice danno luogo ad un unico esame.

#### PRIMO ANNO

<i>Codice</i>	<i>Insegnamenti</i>	<i>1° Semestre Esami</i>
F11001	Istituzioni di Matematica (1° corso)	<1>
F11079	Chimica Generale ed Inorganica	<2>
F11080	Laboratorio di Chimica Generale ed Inorganica	<3>
<i>2° Semestre</i>		
F11008	Chimica Organica (1° corso)	<4>
"	Laboratorio di Chimica Organica (1° corso)	
F11004	Istituzioni di Matematiche (2° corso)	<5>
F11003	Fisica Generale (1° corso)	<6>

**SECONDO ANNO**

<i>Codice</i>	<i>Insegnamenti</i>	1° Semestre
		<i>Esami</i>
F11081	Chimica Analitica (1° corso)	<7>
"	Laboratorio di Chimica Analitica (1° corso)	
F11082	Calcolo Numerico e Programmazione	<8>
F11084	Laboratorio di Chimica Fisica (1° corso)	<9>
		2° Semestre
F11083	Chimica Fisica (1° corso)	<10>
F11012	Chimica Organica (2° corso)	<11>
"	Laboratorio di Chimica Organica (2° corso)	
F11006	Fisica Generale (2° corso)	<12>
"	Laboratorio di Fisica Generale	

**TERZO ANNO**

<i>Codice</i>	<i>Insegnamenti</i>	1° Semestre
		<i>Esami</i>
F11010	Chimica Inorganica (1° corso)	<13>
"	Laboratorio di Chimica Inorganica (1° corso)	
F11085	Chimica Analitica (2° corso)	<14>
"	Laboratorio di Chimica Analitica (2° corso)	
F11011	Chimica Fisica (2° corso)	<15>
		2° Semestre
F11011	Laboratorio di Chimica Fisica (2° corso)	<15>
F11014	Chimica Biologica (1° corso)	<16>
Opzionale *		<17>
Opzionale *		<18>

e, inoltre:

F11015 Prova della Conoscenza della Lingua Inglese

Si consiglia gli studenti di sostenere l'esame di "Prova della Conoscenza della Lingua Inglese" (F11015) entro il Triennio Propedeutico.

*I corsi Opzionali 17 e 18 sono da scegliersi fra i seguenti insegnamenti:*

F11022	Chimica Computazionale	1° Semestre
F11027	Chimica Fisica (Complementi)	"
F11039	Chimica dei Composti di Coordinazione	"
F11046	Chimica Bioorganica	"
F11031	Chemiometria	2° Semestre
F12032	Chimica delle Macromolecole	"
F11033	Chimica Teorica (Quantistica)	"
F11053	Chimica Organica (Applicata)	"
F11054	Elettrochimica	"
F11060	Strutturistica Chimica	"

La scelta dei due corsi Opzionali non è necessariamente vincolata alla scelta dell'Indirizzo che lo studente intende seguire nel Biennio di Applicazione.

**PER GLI STUDENTI IMMATRICOLATI FINO ALL'A.A. 1997/98**

**Si ricorda agli studenti che si iscrivono al 2° e 3° anno in corso che, per loro, l'organizzazione degli studi del Triennio resta quella dell'a.a. 1997/98, fatta eccezione per i corsi di "Chimica Organica 1° corso" e "Lab. Chimica**

**Organica 1° corso” che da questo anno accademico vengono semestralizzati e collocati nel 2° semestre del secondo anno.**

## BIENNIO DI STUDI DI APPLICAZIONE

### REQUISITI PER L'AMMISSIONE AL BIENNIO

I requisiti per l'ammissione al quarto anno (Biennio di Studi Applicativi) verranno ridiscussi e approvati nel corso del mese di settembre p.v.

L'esame di "Prova della Conoscenza della Lingua Inglese" non va conteggiato anche se sostenuto nel Triennio.

**Tutti gli esami del Triennio Propedeutico dovranno comunque essere sostenuti prima di quelli del Biennio di Applicazione.**

### ORGANIZZAZIONE DEGLI STUDI

Il Biennio comporta il superamento di 7 esami e si articola in Indirizzi. Sono previsti i seguenti indirizzi:

- **Chimica Inorganica,**
- • **Chimica Fisica,**
- • **Chimica Organica.**

Gli Indirizzi sono a loro volta articolati in Orientamenti. E' anche prevista la possibilità di un Piano di Studio Liberalizzato.

La scelta di un piano di studio sulla base degli Indirizzi definiti dal Nuovo Ordinamento del Corso di Laurea in Chimica deve prevedere oltre a:

n° 16	esami Fondamentali del Triennio	(dal n° 1 al n° 16)
n° 1	esame di Prova di Conoscenza della Lingua Inglese	
n° 2	esami Opzionali del Triennio	(dal n° 17 al n° 18)
anche:		
n° 2	esami Fondamentali d'Indirizzo	(dal n° 19 al n° 20)
n° 5	esami Opzionali	(dal n° 21 al n° 25)

I corsi devono essere distribuiti nel Biennio come segue:

#### Quarto anno

Insegnamento	Esame
1° Fondamentale d'Indirizzo (Corso di lezioni + Relativo Corso di Laboratorio)	<19>
2° Fondamentale d'Indirizzo (corso di lezioni + Relativo Corso di Laboratorio)	<20>
1° Opzionale	<21>
2° Opzionale	<22>

#### Quinto anno

3° Opzionale	<23>
4° Opzionale	<24>
5° Opzionale	<25>

Per la scelta dell'Indirizzo del Biennio, lo studente deve segnalare quattro corsi Fondamentali d'Indirizzo (FI-Due corsi base e rispettivi laboratori) e cinque corsi Opzionali (O), oltre ai due Opzionali già scelti nel Triennio.

Gli Opzionali del Triennio possono essere scelti anche come Opzionali del Biennio.

I Corsi Fondamentali d'Indirizzo (FI) sono obbligatori. Possono essere scelti fino a due Opzionali fuori dall'elenco degli opzionali previsti per quell'Indirizzo, anche tra gli insegnamenti di altri Corsi di Laurea della Facoltà di Scienze

MM.FF.NN. (In questo caso il piano di studio va presentato su modulo della Segreteria).

Qualora lo studente opti per un Piano di Studio Liberalizzato scegliendo più di due corsi opzionali al di fuori di quelli previsti da un Indirizzo dovrà indicare cinque degli Opzionali elencati nel modulo.

Come Opzionali possono essere scelti anche i corsi teorici dei Fondamentali d'Indirizzo (FI) o i relativi laboratori.

Il Piano Liberalizzato può anche prevedere la scelta di Fondamentali d'Indirizzi (FI) presi da diversi Indirizzi:

- 1) Chimica Inorganica (2° corso) e Lab. Chimica Inorganica (2° corso) +  
Chimica Organica (3° corso) e Lab. Chimica Organica (3° corso)
- 2) Chimica Fisica (3° corso) e Lab. Chimica Fisica (3° corso) +  
Chimica Organica (3° corso) e Lab. Chimica Organica (3° corso)
- 3) Chimica Fisica (3° corso) e Lab. Chimica fisica (3° corso) +  
Chimica Inorganica (2° corso) e Lab. Chimica Inorganica (2° corso)

Si ricorda che non può essere scelta per es. la Chimica Organica (4° corso) se non è stata scelta anche la Chimica Organica (3° corso), mentre è possibile il contrario.

### **PROPEDEUTICITÀ**

Nel sostenere gli esami devono essere osservate le seguenti propedeuticità:

- 1) gli esami di “Chimica Generale e Inorganica” e di “Lab. di Chimica Generale e Inorganica” sono propedeutici a tutti gli altri esami su materie chimiche; l'esame di “Istituzioni di Matematiche (1° corso)” è propedeutico agli esami di “Chimica Fisica (1° corso)” e di “Laboratorio di Chimica Fisica (1° corso)”.
- 2) gli esami indicati con 1°, 2°, 3° e 4° corso devono essere sostenuti secondo l'ordine progressivo (non è consentito sostenere l'esame di 2° corso prima di quello corrispondente di 1° corso, analogamente per l'esame di 3° corso rispetto a quello di 2° corso e per l'esame di 4° corso rispetto a quello di 3° corso).

## INDIRIZZI DEL BIENNIO

Si ricorda che tutti gli insegnamenti Opzionali possono frequentati e collocati in piano di studio in anni diversi da quelli riportati nel presente Manifesto.

### INDIRIZZO: Chimica Inorganica

#### Fondamentali d'Indirizzo

1. F11016	Chimica Inorganica 2° corso	IV/1°
"	Lab. di Chimica Inorganica 2° corso	IV/2°
2. F11017	Chimica Inorganica 3° corso	IV/2°
"	Laboratorio di Chimica Inorganica 3° corso	IV/2°

I corsi di *Chimica Inorganica 2° corso di Laboratorio di Chimica Inorganica 2° corso* danno luogo ad una prova di accertamento unica così come i corsi di *Chimica Inorganica 3° corso e Laboratorio di Chimica Inorganica 3° corso*.

#### Opzionali d'Indirizzo

##### a) Orientamento: *Chimica Organometallica e Catalisi*

F11039	Chimica dei Composti di Coordinazione	III/1°
F11028	Chimica Inorganica (Applicazioni)	IV/1°
F11032	Chimica Inorganica (Reattività Composti Organometallici)	IV/1°
F11029	Chimica Inorganica (Complementi)	IV/2°
F11034	Meccanismi di Reazione in Chimica Inorganica	IV/2°
F11024	Chimica Bioinorganica*	V
F11051	Chimica Metallorganica	V/2°
F12044	Chimica Inorganica (dei Materiali) **	V/2°

\* = Mutuato dalla Facoltà di Farmacia

\*\* = Chimica Industriale

##### b) Orientamento: *Chimica Inorganica Strutturale*

F11039	Chimica dei Composti di Coordinazione	III/1°
F11060	Strutturalistica Chimica	III/2°
F11040	Chimica Fisica dello Stato Solido e Superfici	IV/1°
F11030	Chimica Inorganica (Cristallochimica)	IV/1°
F11049	Chimica dello Stato Solido	V/1°
F11045	Chimica Bioinorganica (Biocristallografia)	V/2°
F12044	Chimica Inorganica (dei Materiali) **	V/2°

\*\* = Chimica Industriale



## INDIRIZZO: Chimica Fisica

### Fondamentali d'Indirizzo

1. F11018	Chimica Fisica 3° corso	IV/1°
"	Laboratorio di Chimica Fisica 3° corso	IV/1°
2. F11019	Chimica Fisica 4° corso	IV/2°
"	Laboratorio di Chimica Fisica 4° corso	IV/2°

I corsi di *Chimica Fisica 3° corso* e *Laboratorio di Chimica Fisica 3° corso* danno luogo ad una prova di accertamento unica così come i corsi di *Chimica Fisica 4° corso* e *Laboratorio di Chimica Fisica 4° corso*.

### Opzionali d'Indirizzo

#### a) Orientamento: *Elettrochimico*

F11054	Elettrochimica	III/2°
F11038	Chimica dei Sistemi Dispersi e Interfasi	IV/1°
F11040	Chimica Fisica dello Stato Solido e delle Superfici	IV/1°
F12035	Scienza dei Metalli **	IV/1°
F12028	Chimica Fisica dei Materiali **	IV/2°
F12041	Misure Elettriche **	IV/2°
F12054	Metallurgia **	IV/2°
F11085	Laboratorio di Elettrochimica	IV/2°
F11044	Elettrochimica (Organica)	IV/2°
F12047	Elettrochimica (Industriale) **	V/1°
F12042	Corrosione e Protezione dei Materiali Metallici **	V/1°

\*\* = Chimica Industriale

#### b) Orientamento: *Sperimentale-Applicativo*

F11022	Chimica Computazionale	III/2°
F11054	Elettrochimica	III/2°
F11060	Strutturistica Chimica	III/2°
F11031	Chemiometria	III/2°
F11038	Chimica Fisica Sistemi Dispersi e Interfasi	IV/1°
F11040	Chimica Fisica Dello Stato Solido e Superfici	IV/1°
F12035	Scienza dei Metalli **	IV/1°
F12028	Chimica Fisica dei Materiali **	IV/2°
F12054	Metallurgia **	IV/2°
F12049	Cinetica Chimica e Dinamica Molecolare **	IV/2°
F12047	Elettrochimica (Industriale) **	V/1°
F12042	Corrosione e Protezione dei Materiali Metallici **	V/1°
F12053	Fotochimica **	IV/1°
F11063	Spettroscopia Molecolare	V/2°

\*\* = Chimica Industriale

c) Orientamento: *Teorico*

F11027	Chimica Fisica (Complementi)	III/1°
F11022	Chimica Computazionale	III/2°
F11033	Chimica Teorica (Quantistica)	III/2°
F11058	Chimica Teorica	V/1°
F11063	Spettroscopia Molecolare	V/2°
F16016	Metodi Matematici della Fisica *	
F09023	Metodi Matematici e Statistici **	
F16014	Struttura della Materia *	
F16101	Programmazione *	
F16140	Programmazione I (semestrale) *	
F16141	Programmazione II (semestrale) *	

\* = Fisica

\*\* = Scienze Biologiche

## INDIRIZZO: Chimica Organica

### Fondamentali d'Indirizzo

1. F11020	Chimica Organica 3° corso	IV/1°
”	Laboratorio di Chimica Organica 3° corso	IV/1°
2. F11021	Chimica Organica 4° corso	IV/2°
”	Laboratorio di Chimica Organica 4° corso	IV/2°

I corsi di *Chimica Organica 3° corso* di *Laboratorio di Chimica Organica 3° corso* danno luogo ad una prova di accertamento unica così come i corsi di *Chimica Organica 4° corso* e *Laboratorio di Chimica Organica 4° corso*.

### Opzionali dell'Orientamento: a) *Bioorganico*

F11046	Chimica Bioorganica	III/1°
F11023	Metodi Fisici in Chimica Organica	IV/1°
F11042	Chimica delle Sostanze Organiche Naturali	IV/1°
F11024	Chimica Bioinorganica *	IV/1°
F11048	Chimica della Fermentazione e Microbiologia Industriale	IV/2°
F12040	Chimica dei Processi Biotecnologici **	IV/2°
F11056	Chimica Organica (Superiore)	V/2°
F09130	Farmacologia Molecolare (Semestrale) ***	V
F09079	Biochimica Industriale (Semestrale) ***	V

### Opzionali dell'Orientamento: *Sintesi*

F11053	Chimica Organica (Applicata)	III/2°
F12032	Chimica delle Macromolecole **	III/2°
F11037	Sintesi e Tecniche Speciali Organiche	IV/1°
F11023	Metodi Fisici in Chimica Organica	IV/1°
F11055	Chimica Organica (Complementi) §	IV/2°
F11041	Chimica dei Composti Eterociclici	IV/2°
F11044	Elettrochimica (Organica)	IV/2°
F11057	Chimica dei Composti Organometallici	IV/2°
F12021	Chimica Organica Industriale **	IV/2°
F11059	Meccanismi di Reazione in Chimica Organica	V/2°
F11064	Stereochimica (Organica)	V/2°

§ = Mutuato da Chimica Organica Applicata di Chimica Industriale

\* = Mutuato da Farmacia

\*\* = Chimica Industriale

\*\*\* = Scienze Biologiche. Questi 2 esami assieme valgono un esame per Chimica

Gli studenti che intendono seguire l'Indirizzo Chimica Organica devono sostenere almeno 5 dei 7 opzionali previsti dal Manifesto degli Studi, nell'ambito degli opzionali dell'Indirizzo di Chimica Organica.

La scelta dell'Indirizzo di Chimica Organica non comporta necessariamente la scelta di uno degli orientamenti; in questo caso gli opzionali possono essere scelti liberamente nell'ambito di entrambi gli orientamenti.

## PIANO DI STUDIO LIBERALIZZATO

Un piano di Studio diventa Liberalizzato quando lo studente sceglie più di due Opzionali al di fuori dell'elenco degli Opzionali d'Indirizzo oppure quando sceglie Opzionali (fino ad un massimo di due) tra gli insegnamenti del Politecnico di Milano sottoelencati:

EST061	Economia e Organizzazione Aziendale
EST218	Diritto Commerciale
EST219	Radiochimica e Chimica delle Radiazioni

Si possono scegliere come Opzionali anche i Fondamentali d'Indirizzo.

Si possono scegliere Fondamentali d'Indirizzo presi da diversi Indirizzi secondo il seguente schema:

- Chimica Inorganica 2° corso + Lab./Chimica Organica 3° corso + Lab.
- Chimica Fisica 3° corso + Lab./Chimica organica 3° corso + Lab.
- Chimica Fisica 3° corso + Lab./Chimica Inorganica 2° corso + Lab.

In ogni caso anche nella scelta del Piano Liberalizzato vanno rispettate le seguenti regole:

- |                                       |                      |
|---------------------------------------|----------------------|
| a) 16 esami Fondamentali del Triennio | (dal n° 1 al n° 16)  |
| b) 2 esami Opzionali del Triennio     | (dal n° 17 al n° 18) |
| c) 2 esami Fondamentali d'Indirizzo   | (dal n° 19 al n° 20) |
| d) 5 esami Opzionali                  | (dal n° 21 al n° 25) |

I Corsi devono essere distribuiti nel Biennio come segue:

### Quarto anno

1° Fondamentale d'Indirizzo (Corso di lezioni + Relativo Corso di Laboratorio)	<19>
2° Fondamentale d'Indirizzo (Corso di lezioni + Relativo Corso di Laboratorio)	<20>
1° Opzionale	<21>
2° Opzionale	<22>

### Quinto anno

3° Opzionale	<23>
4° Opzionale	<24>
5° Opzionale	<25>

## ESENZIONE DALLE TASSE

Per quanto riguarda l'esenzione dalle tasse ed ogni provvidenza a favore degli studenti meritevoli, si stabilisce che gli studenti immatricolati a partire dall'a.a. 1996/97 abbiano debbano superare il seguente numero di esami per anno di corso:

- non meno di 5 esami al termine del 1° anno
- non meno di 10 esami al termine del 2° anno
- non meno di 16 esami al termine del 3° anno
- non meno di 20 esami al termine del 4° anno

Per gli studenti immatricolati precedentemente all'a.a. 1996/97 valgono le norme precedenti:

- 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

### **PRESENTAZIONE DEL PIANO DI STUDIO**

Il piano di Studio si presenta dal 1° agosto al 31 dicembre all'inizio del 4° anno tramite i terminali self service del SIFA oppure, in casi particolari, su modulo alle Segreterie di via Celoria, 20.

### **AMMISSIONE AL LABORATORIO DI TESI**

Durante il Biennio di Applicazione lo studente deve svolgere un lavoro di tesi della durata di un anno solare, secondo le norme del Regolamento Tesi di Laurea (vedi libretto Programmi dei Corsi 1998/99), su argomenti attinenti l'Indirizzo e il Piano di Studio prescelto. Per essere ammesso a svolgere la ricerca di tesi lo studente deve aver sostenuto tutti gli esami meno 6 opzionali o, in alternativa, 1 fondamentale d'Indirizzo con relativo laboratorio e 4 opzionali, ecc. secondo la normativa riportata nel Regolamento per l'Ammissione allo Svolgimento della Tesi di Laurea. La domanda di ammissione deve essere sottoposta al giudizio del Consiglio del Corso di Laurea.

### **TESI DI LAUREA**

Per essere ammesso 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. L'esame di laurea consiste nella discussione della ricerca relativa alla tesi con le modalità stabilite dal Consiglio del Corso di Laurea, in applicazione alle disposizioni vigenti.

Milano, luglio 1998

**IL PRESIDE  
FACOLTA' DI SCIENZE  
prof. Marcello Fontanesi**

**IL PRESIDENTE  
CHIMICA  
prof. Francesco Cariati**

## REGOLAMENTO PER L'AMMISSIONE ALLO SVOLGIMENTO DELLA TESI DI LAUREA

Per essere ammesso 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.

L'esame di laurea consiste nella discussione della tesi con le modalità stabilite dal Consiglio del Corso di Laurea, in applicazione alle disposizioni vigenti.

### REGOLAMENTO PER LO SVOLGIMENTO DELLE TESI DI LAUREA IN CHIMICA (Nuovo Ordinamento)

#### 1. Tipologia delle tesi

Le tesi di laurea si distinguono in:

- 1) Tesi Sperimentali
- 2) Tesi Compilative

##### *1.1) Tesi di laurea sperimentali*

Consistono in una dissertazione scritta sulle ricerche originali di carattere chimico compiute dallo studente sotto la guida di un Relatore, svolte nel laboratorio precisato nella domanda di ammissione.

Le tesi di Laurea Sperimentali si distinguono in:

- Tesi Sperimentali Interne
- Tesi Sperimentali Esterne

1.1a. Tesi sperimentali interne: sono quelle svolte presso il Dipartimento di Chimica Inorganica, Metallorganica e Analitica, il Dipartimento di Chimica Organica e Industriale, il Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica e il Dipartimento di Chimica Strutturale e Stereochimica Inorganica dell'Università di Milano e presso i Laboratori di Docenti Ufficiali del Corso di Laurea in Chimica che non afferiscono a tali Dipartimenti.

1.1b. Tesi sperimentali esterne: sono quelle svolte presso Laboratori di Università e di Enti Pubblici di Ricerca diversi da quelli indicati al punto 1.1a.

##### *1.2) Tesi di laurea compilative*

Consistono in una dissertazione scritta su ricerche bibliografiche, compiute dallo studente, sotto la guida di un Relatore, su un argomento di carattere chimico.

#### 2. Relatori di tesi di laurea in chimica

Il Relatore della Tesi di Laurea è il garante scientifico nei confronti del Consiglio del Corso di laurea in Chimica della ricerca assegnata al laureando e del suo corretto svolgimento. Il Relatore è unico. Possono essere Relatori di Tesi di Laurea in Chimica tutti i Docenti Ufficiali (anche fuori ruolo) del Corso di Laurea in Chimica e di materie chimiche di altri Corsi di Laurea afferenti ai Dipartimenti Chimici sopra citati, gli Assistenti e i Ricercatori Confermati afferenti a tali Dipartimenti. Possono essere Relatori di tesi di laurea in Chimica anche i Ricercatori C.N.R. che afferiscono ai Centri convenzionati con i Dipartimenti Chimici sopradetti, purché svolgano attività didattica ufficiale in corsi di insegnamento di materie chimiche presso la Facoltà di Scienze MFN. Il Relatore può essere coadiuvato da un massimo di due Correlatori.

#### 3. Correlatori di tesi di laurea in chimica

Possono essere Correlatori di Tesi di Laurea in Chimica, oltre a coloro che possono essere Relatori, tutti i laureati cultori di materie chimiche ufficialmente strutturati nei Dipartimenti Chimici sopra citati. In assenza di queste condizioni, il Relatore deve documentare brevemente per iscritto la competenza specifica del Correlatore proposto sull'argomento dalla ricerca di tesi.

#### **4. Durata della 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.

#### **5. Frequenza al laboratorio delle tesi sperimentali**

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

#### **6. Sessioni di ingresso in tesi e di laurea**

Le ammissioni in tesi avvengono nei mesi di Maggio, Luglio, Novembre e Marzo di ogni Anno Accademico, in concomitanza con le Sedute di Laurea. Le domande di ammissione in tesi, complete di tutta la documentazione richiesta, devono essere presentate tassativamente alla Segreteria Didattica entro le date riportate nel Manifesto degli Studi, tra le Informazioni generali.

#### **7. Norme speciali per le tesi sperimentali esterne e per le tesi compilative**

CIRCA UN MESE PRIMA DELL'ESAME DI LAUREA IL LAUREANDO ILLUSTRERÀ LE CONCLUSIONI DELLE PROPRIE RICERCHE IN UN SEMINARIO PUBBLICO, ALLA PRESENZA DI QUATTRO DOCENTI UFFICIALI DI MATERIE CHIMICHE, NOMINATI DAL PRESIDENTE DELLA COMMISSIONE TESI DI LAUREA.

#### **8. Condizioni per l'ammissione**

Per essere ammesso al laboratorio di tesi lo studente deve autocertificare di :

- 1) aver superato tutti gli esami Fondamentali del Triennio Propedeutico e la Prova di Conoscenza della Lingua Inglese
- 2) aver frequentato i Laboratori dei corsi Fondamentali d'Indirizzo del 4° anno
- 3) aver superato tutti gli esami previsti dal Piano di Studi con l'eccezione di:
  - cinque Opzionali
  - o, in alternativa:
  - un Fondamentale d'Indirizzo (e relativo Laboratorio) e quattro Opzionali,
  - o, in alternativa:
  - due Fondamentali d'Indirizzo (e relativi Laboratori) e due Opzionali.

#### **9. Domande di ammissione in tesi**

##### *9.1a. Tesi Sperimentali Interne*

Lo studente che intende svolgere una tesi Sperimentale Interna deve presentare alla Segreteria Didattica, entro i termini precisati al punto 6., la domanda di ammissione in tesi sottoscritta dal Relatore, indicando il Dipartimento o Istituto presso il quale intende svolgere la tesi e l'argomento della ricerca.

L'elenco delle tematiche di ricerca disponibili è contenuto nelle pagine finali della presente Guida.

Le domande sono soggette all'approvazione del CCL.

##### *9.1b. Tesi Sperimentali Esterne*

Lo studente che intende svolgere una Tesi Sperimentale Esterna deve presentare alla Segreteria Didattica, entro i termini precisati al punto 6., la domanda di ammissione in tesi, sottoscritta dal Relatore, indicando l'Ente presso il quale intende svolgere la tesi e l'argomento della ricerca.

Alla domanda vanno allegati:

- 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.

Il Consiglio del Corso di Laurea valuta la richiesta dello studente accertando la validità delle motivazioni e l'impossibilità di svolgere la ricerca sullo stesso argomento o su argomento affine, presso i Dipartimenti Chimici sopra citati.

#### *9.2 Tesi Compilative*

Lo studente che intenda svolgere una Tesi Compilativa deve presentare alla Segreteria Didattica, entro i termini precisati al punto 6., la domanda di ammissione in tesi, sottoscritta dal Relatore, indicando l'argomento della ricerca bibliografica che intende svolgere.

#### *10. Casi particolari*

Casi particolari, anche in deroga al presente Regolamento, potranno essere considerati dal Consiglio del Corso di Laurea.



**CORSO DI LAUREA IN CHIMICA**

**PROGRAMMI DEGLI INSEGNAMENTI  
DEL TRIENNIO DI STUDI PROPEDEUTICI**

## INSEGNAMENTI FONDAMENTALI

### 1. ISTITUZIONI DI MATEMATICHE (1° corso) (F11001)

PROF. STEFANIA DE STEFANO

#### *Campi numerici*

Campo razionale. Campo dei numeri reali e suo ordinamento. Equivalenza della proprietà di completezza con l'esistenza dell'estremo superiore (risp.: inferiore) di ogni insieme superiormente (risp.: inferiormente) limitato di numeri reali. Nozione di intervallo sulla retta reale (aperto, chiuso, limitato o non) e di intorno di un punto. Il campo complesso. Forma algebrica e forma trigonometrica dei numeri complessi. Piano di Argand-Gauss. Esistenza di  $n$  radici  $n$ -esime di un numero complesso. Teorema fondamentale dell'algebra.

#### *Algebra lineare e geometria analitica*

Lo spazio vettoriale  $\mathbb{R}^n$ . Sottospazi vettoriali; sistemi di vettori indipendenti; basi; dimensione; Prodotto scalare; ortogonalità tra vettori. Norma di un vettore: sue proprietà algebriche; disuguaglianze di Cauchy-Schwartz e triangolare. Basi ortonormali. Prodotto vettoriale in  $\mathbb{R}^3$  e determinante delle matrici  $3 \times 3$ . Applicazioni alla geometria analitica piana e spaziale: rappresentazione parametrica e cartesiana di rette e piani; incidenza, parallelismo; riconoscimento di rette sghembe. Distanza tra due punti, tra un punto e una retta nel piano e nello spazio, tra un punto e un piano. Cenni alle equazioni canoniche di ellissi, iperboli e parabole nel piano; parametrizzazione delle ellissi (coordinate polari).

#### *Funzioni*

Generalità: concetto di funzione tra due insiemi (in particolare di numeri reali); dominio e codominio di una funzione; composizione di funzioni, funzioni iniettive, suriettive, biunivoche, invertibili. Funzioni reali di variabile reale: grafico; funzioni limitate, massimi (o minimi) assoluti o relativi per una funzione; funzioni monotone, funzioni convesse (concave). Operazioni aritmetiche sulle funzioni. Parità; periodicità. Funzioni elementari: funzioni lineari, funzioni potenza, funzione esponenziale e sua inversa, funzioni trigonometriche e loro inverse, funzioni iperboliche.

#### *Successioni numeriche*

Limite di una successione (sua unicità). Carattere delle successioni monotone. Teorema della permanenza del segno. Criteri di convergenza (di Cauchy, del confronto con una coppia di successioni), limitatezza delle successioni convergenti. Calcolo del limite di una successione; forme di indecisione e limiti notevoli. Asintoticità: suo uso nel calcolo dei limiti infinitesimi (infiniti): loro confronto; ordine di infinitesimo (infinito); concetto di  $o$ . Criteri del rapporto e della radice.

#### *Limiti di funzioni e funzioni continue*

Definizione di limite di una funzione  $f(x)$  per  $x$  che tende ad  $A$  (finito o non); limiti dalla sinistra e dalla destra. Proprietà e concetti derivanti da quelli dei limiti di successioni. Asintoti verticali, orizzontali ed obliqui. Continuità in un punto e su un intervallo; tipi di discontinuità con esempi. Chiusura dell'insieme delle funzioni continue in un punto rispetto alle operazioni aritmetiche e alla composizione. Teoremi per funzioni continue su un intervallo chiuso e limitato: di esistenza degli zeri di esistenza dei valori intermedi, di limitatezza e di esistenza degli estremi assoluti; teorema delle piccole oscillazioni. Esempi e controesempi. Determinazione degli zeri di una funzione continua mediante il metodo di bisezione.

#### *Calcolo differenziale*

Tasso di incremento di una funzione reale di variabile reale, derivata, retta tangente al grafico di una funzione, punti angolosi e cuspidi. Derivate successive. Approssimazione lineare di una funzione derivabile nell'intorno di un punto: connessioni della derivabilità con la continuità e con la differenzialità. Calcolo delle derivate delle funzioni elementari. Regole di derivazione: delle funzioni composte, della somma, del prodotto, del reciproco; derivabilità dell'eventuale inversa di una funzione derivabile.

#### *Applicazione del calcolo differenziale*

Teorema di annullamento della derivata prima in un estremo relativo. Teorema del valor medio (Rolle-Lagrange) e sue applicazioni: relazioni tra le primitive di una stessa funzione; studio degli intervalli di monotonia di una funzione e ricerca dei punti estremanti; caratterizzazione delle funzioni derivabili convesse, ricerca dei punti di flesso. Teorema della media di Cauchy e teorema di approssimazione polinomiale (di Taylor) con il resto nella forma di Lagrange (con stima); polinomi di MacLaurin di funzioni elementari. Uso dei polinomi di Taylor nel calcolo di limiti, nel calcolo approssimato del valore assunto da una funzione in un punto; criterio generale per la determinazione dei punti estremanti o di flesso di una funzione più volte derivabile. Studio di funzioni.

#### *Calcolo integrale*

Somme inferiori e somme superiori associate ad una partizione di un intervallo chiuso limitato, relative ad una funzione limitata; funzioni Riemann-integrabili.

Classi di funzioni Riemann-integrabili (continue, limitate con un numero finito di discontinuità, monotone). Integrale definito: suo significato geometrico e proprietà. Determinazione delle aree di regioni piane limitate; determinazione del volume di solidi di rotazione e non. Funzione integrale. Teorema del valor medio, teorema fondamentale del calcolo integrale e conseguenze sul calcolo dell'integrale definito di una funzione continua. Integrali indefiniti: integrazione per scomposizione, per sostituzione, per parti. Cenni all'integrazione delle funzioni razionali fratte. Limiti negli estremi del dominio di una funzione integrale: integrali impropri di prima e di seconda specie (con esempi chiave). Criteri sufficienti per l'esistenza dell'integrale improprio di funzioni positive (del confronto, del confronto asintotico, degli infinitesimi o degli infiniti).

#### *Serie numeriche*

Convergenza semplice ed assoluta di una serie di numeri reali, sua somma. Esempi: serie telescopiche, serie geometrica, serie armonica. Criterio di convergenza di Cauchy; criteri per serie a termini non negativi (del confronto, del confronto integrale, della radice e del rapporto, del confronto asintotico, degli infinitesimi). Esempi: serie armoniche generalizzate, serie esponenziali ecc. Criterio di convergenza per serie con termini a segni alterni.

#### *Serie di funzioni*

Convergenza puntuale ed uniforme di una serie di funzioni. Criterio di Weierstrass per l'uniforme convergenza; ricerca del raggio di uniforme convergenza di serie di potenze. Condizioni per la sviluppabilità in serie di Taylor di una funzione. Sviluppi di MacLaurin di funzioni elementari.

#### *Testi ed eserciziari suggeriti*

Marcellini, Sbordone: *Calculus*, Ed. Liguori, Napoli (1992).

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

Avantaggiati: *Istituzioni di matematica*, Casa Editrice Ambrosiana, Milano (1991).

Bertsch: *Istituzioni di matematica*, Ed. Bollati Boringhieri, Torino (1994).

De Biase, Fumagalli, Zanco: *Esercizi e complementi di Analisi Matematica*, Ed. Giappichelli Torino.

Sono a disposizione degli studenti anche appunti delle lezioni e svolgimenti dei temi d'esame.

## **2A. CHIMICA GENERALE E INORGANICA (F11079)**

PROF. SERGIO CENINI

#### *Atomi e loro struttura*

Particelle elementari presenti nell'atomo. Isotopi, simboli degli elementi, pesi atomici relativi e assoluti. Difetto di massa. La quantizzazione dell'energia. Teoria di Bohr per l'atomo di idrogeno. Introduzione alla meccanica quantistica. Rappresentazione grafica degli orbitali e della densità elettronica radiale. Classificazione degli orbitali e numeri quantici. Principio di esclusione di Pauli e regola di Hund (9 ore).

#### *Il sistema periodico degli elementi*

La tavola periodica degli elementi. Energia di ionizzazione. Affinità elettronica (2 ore).

#### *Il legame chimico*

Il legame ionico. Il legame covalente. Strutture di Lewis. Il legame dativo. Elettronegatività. Mesomeria e risonanza. Legame coordinativo. Legame di idrogeno. Interazioni elettrostatiche. Legame covalente e geometria molecolare. Orbitali ibridi. Orbitali molecolari. OM Localizzati e delocalizzati. Legami tricentrici. Legame chimico nei metalli. Isolanti e semiconduttori (12 ore).

#### *Lo stato solido e gassoso*

Raggi atomici. Cristalli molecolari. Cristalli ionici. Altre strutture cristalline. La pressione. Leggi dei gas. Comportamento dei gas reali (2 ore).

#### *Termodinamica chimica*

Sistemi e funzioni di stato. Lavoro e calore. Primo principio della termodinamica. Calore di reazione e entalpia. Energia di legame e calore di reazione. Entropia e secondo principio della termodinamica. Terzo principio della termodinamica. Energia libera e costante di equilibrio. Dipendenza della costante di equilibrio dalla temperatura (5 ore).

#### *Stato liquido e soluzioni*

Regola delle fasi. Tensione di vapore delle soluzioni e legge di Raoult. Punto di ebollizione e punto di congelamento di una soluzione. La distillazione. Soluzioni sature e solubilità. La pressione osmotica. Solubilità dei gas nei liquidi. Lo stato colloidale. Coefficienti di attività (3 ore).

#### *Velocità di reazione*

Ordine di reazione. Processi elementari e meccanismo di reazione. Energia di attivazione. Dipendenza della velocità di reazione dalla temperatura. Reazioni fotochimiche. Velocità di reazione e equilibrio chimico. I catalizzatori (3 ore).

#### *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 (2 ore).

#### *Elettrochimica*

Conducibilità elettrica delle soluzioni acquose. Energia libera e lavoro elettrico. Le pile. Potenziali di ossidoriduzione. Titolazioni potenziometriche. Misure potenziometriche del pH. L'elettrolisi. Sovratensione. Pile di pratico impiego (6 ore).

#### *Composti di coordinazione*

Il legame coordinativo. Primi sviluppi. Teoria del legame di valenza. Leganti polidentati e chelanti. Leganti a ponte. Carbonilmetalli e cianometallati. I composti di coordinazione in chimica analitica. Isomeria nei composti di coordinazione (2 ore).

#### *Radioattività e chimica nucleare*

Stabilità nucleare e radioattività. Radiazioni *alfa*, *beta* e *gamma*. Famiglie radioattive nucleari. Radioattività artificiale. Impiego degli atomi radioattivi. Fissione e fusione nucleare (2 ore).

#### *Chimica Inorganica*

Proprietà periodiche. Gli ossidi e gli idruri. Idrogeno e ossigeno. I gas nobili. Gli alogeni. Lo zolfo. Azoto e fosforo. Carbonio e silicio. Boro e alluminio. I metalli alcalini. Rame, argento e oro. I metalli alcalino terrosi. Zinco e mercurio. Il cromo. Il manganese. Il ferro (12 ore).

#### *Testi consigliati*

L. Malatesta, S. Cenini, Principi di Chimica Generale con esercizi, Casa Editrice Ambrosiana – Milano (1989).

L. Malatesta, Compendio di Chimica Inorganica, Casa Editrice Ambrosiana, Milano (1992).

### **2B. LABORATORIO DI CHIMICA GENERALE ED INORGANICA A e B (F11080)**

PROF. LUIGI GARLASCHELLI -

Calcolo dimensionale. Significatività delle misure. Arrotondamento (2 ore).  
Unità di massa atomica. Numero di Avogadro. Mole. Peso atomico, peso molecolare, peso formula (2 ore).  
Formule chimiche. Rapporti in peso tra gli elementi che compaiono in una formula. Calcolo della composizione in peso data una formula (3 ore).  
Rapporti in moli e in peso nelle reazioni chimiche. Equazioni chimiche bilanciate: reagenti in difetto e in eccesso, agente limitante. Rendimento e conversione di una reazione (2 ore).  
Numeri di ossidazione (2 ore).  
Tipi di reazioni chimiche: acido-base, ossido-riduzione. Bilanciamento delle equazioni chimiche noti i reagenti e i prodotti. Bilanciamento delle equazioni chimiche di ossido-riduzione (5 ore).  
Numero di equivalenza per le reazioni di ossido-riduzione per le reazioni acido-base. Equivalente peso equivalente (2 ore).  
Le soluzioni. Modi per esprimere la composizione (1 ora).  
Analisi gravimetrica, analisi volumetrica: titolazioni acido-base e ossidimetriche (5 ore).  
L'equazione di stato dei gas ideali, miscele di gas ideali. Miscugli gassosi a comportamento ideale: frazioni molari, pressioni parziali (2 ore).  
Legge di Raoult. Proprietà colligative delle soluzioni diluite in soluti non volatili: abbassamento della tensione di vapore, criscopia, ebullioscopia, pressione osmotica. Influenza della eventuale dissociazione del soluto. Calcolo di pesi molecolari (5 ore).  
Costanti di equilibrio. Grado di avanzamento di una reazione (5 ore).  
Dissociazione elettrolitica. Elettroliti forti e deboli. Prodotto ionico dell'acqua. Soluzioni neutre, acide e basiche. pH e pOH. Calcoli relativi al pH. Grado di dissociazione: influenza sulle proprietà colligative (5 ore).  
Equilibrio omogeneo, ionico, in soluzione acquosa riguardante gli ioni complessi (2 ore).  
Solubilità e prodotto di solubilità. Calcoli relativi alla formazione di precipitato per miscelamento di soluzioni. Calcoli relativi alla solubilità in presenza di equilibri idrolitici e di complessazione (2 ore).  
Variazione della solubilità in funzione del pH (2 ore).  
Elettrochimica. Elettrolisi. Leggi di Faraday (2 ore).  
Potenziali elettrodi di riduzione. Scala elettrochimica. Equazione di Nernst. Calcolo della f.e.m. di una pila. Calcolo di costanti di equilibrio di reazioni di ossido-riduzione (5 ore).  
Termodinamica chimica: applicazioni della legge di Hess. Calcolo di  $\Delta G^\circ$  di reazione. relazione tra  $\Delta G^\circ$  e costante di equilibrio fissata dalla temperatura (2 ore).  
Ad integrazione delle esercitazioni numeriche in aula, vengono effettuate esercitazioni pratiche in laboratorio.  
Tali esercitazioni vertono sull'acquisizione delle più elementari tecniche di base sulla sintesi di semplici composti inorganici e organometallici. Inoltre si effettuerà il riconoscimento di sali inorganici e la separazione di miscele di sali inorganici (60 ore).

#### *Testi consigliati*

P.Ferro, *Calcoli stechiometrici*, Edizioni ETS (Pisa)  
M. Freni, A. Sacco, *Stechiometria*, ed. L.G. Guadagni (Milano).  
A. Ceriotti, F. Porta, *Esercizi di Stechiometria*, Vol. II-Vol. IV, ed. CUSL, (Milano).

### **3. FISICA GENERALE (1° corso) (F11003)**

PROF. MICHELANGELO FAZIO

#### a. Meccanica

##### *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.

##### *Vettori*

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

##### *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 grandezze misurate indirettamente - Errore più probabile.

##### *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.

##### *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.

##### *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 I loro classificazione geometrica.

##### *Energetica*

Lavoro di una forza costante e variabile - Lavoro come area - Energia cinetica e relativo teorema - Forze posizionali o conservative: metodi di riconoscimento, condizioni di Schwartz - 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.

##### *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 - Equazioni cardinali 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.

##### *Meccanica dei fluidi*

Fluido perfetto - Concetto di pressione - Legge di comprimibilità - Legge di viscosità - Principio di isotropia - Principio

di Pascal - Principio di Stevino.

#### *Onde meccaniche*

Moti periodici - Propagazione ondosa - Classificazione delle onde - Propagazione delle onde piane: equazione di D'Alembert - Onde progressive e regressive - Soluzione generale dell'equazione delle onde - Onde piane sinusoidali  
Intensità e potenza delle onde.

#### *b. Termodinamica*

##### *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: 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.

##### *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 delle velocità: maxwelliana; velocità più probabile.

##### *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. Dilatazione e comprimibilità di gas perfetti nelle politropiche.

##### *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.

##### *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 e probabilità termodinamica: equazione di Boltzmann - 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.

#### **4. ISTITUZIONI DI MATEMATICHE (2° corso) (F11004)**

PROF. CLAUDIO VERDI

##### *Algebra lineare*

Spazio vettoriale  $\mathbb{R}^n$ ; prodotto scalare, norma. Sottospazio vettoriale, indipendenza lineare, base, dimensione; teorema

dell'alternativa. Trasformazioni lineari e loro rappresentazione mediante matrici. Matrici invertibili. Nucleo, immagine, rango di una matrice. Determinante di una matrice. Sistemi lineari. Teorema di Rouché-Capelli. Teorema di Cramer. Metodo di eliminazione di Gauss e di Gauss-Jordan. Autovalori e autovettori di una matrice.

#### *Equazioni differenziali ordinarie*

Equazioni differenziali in forma normale e problema di Cauchy. Teorema di Cauchy di esistenza e unicità "in piccolo". Equazioni del primo ordine a variabili separabili, lineari, omogenee, di Bernoulli; equazioni ai differenziali esatti; alcune equazioni di ordine superiore al primo. Equazioni lineari di ordine  $n$ ; il teorema dimensionale, sistema fondamentale di soluzioni, Wronskiano; integrale generale dell'equazione non omogenea. Equazioni lineari di ordine  $n$  a coefficienti costanti: sistema fondamentale di soluzioni della omogenea associata; integrale particolare della non omogenea: il metodo degli annihilatori e di variazione dei parametri.

#### *Curve in $R^n$ , $n = 2, 3$*

Rappresentazione parametrica di una curva in  $R^n$ . Curva semplice, chiusa, regolare; vettore tangente. Rettificabilità di una curva; lunghezza di una curva regolare; lunghezza di una curva in coordinate polari.

#### *Limiti, continuità e calcolo differenziale in $R^n$ , $n = 2, 3$*

Elementi di tipologia in  $R^n$ : punti interni, insiemi aperti; insieme convesso, semplicemente connesso. Campi scalari. Limiti, continuità. Derivate parziali e derivate direzionali. Differenziabilità di un campo scalare e piano tangente. Continuità di un campo scalare differenziabile. Differenziabilità di un campo scalare con derivate parziali continue. Regola di derivazione delle funzioni composte. Derivate parziali del secondo ordine, matrice Hessiana; teorema di Schwarz. Campi vettoriali. Continuità, derivate, matrice Jacobiana.

#### *Superficie in $R^3$*

Rappresentazione parametrica di una superficie in  $R^3$ ; superficie regolare, vettore normale, piano tangente.

#### *Applicazione del calcolo differenziale*

Estremi relativi di un campo scalare; condizione necessaria del gradiente nullo. Formula di Taylor del secondo ordine. La natura di un punto stazionario (massimo, minimo, sella) stabilita per mezzo degli autovalori della matrice Hessiana. Estremi vincolati: metodo dei moltiplicatori di Lagrange. Il teorema di Weierstrass sull'esistenza di massimo e minimo assoluti. Ricerca di massimi e minimi assoluti. Funzioni definite implicitamente e derivate; teorema del Dini.

#### *Integrali curvilinei*

Integrale curvilineo di un campo vettoriale. Campo vettoriale conservativo: indipendenza dell'integrale curvilineo dalla traiettoria. Primo e secondo teorema fondamentale del calcolo integrale per integrali curvilinei; condizioni necessarie e sufficienti affinché un campo vettoriale sia un gradiente. Espressione di una funzione potenziale. Condizione necessaria del rotore nullo; la condizione è sufficiente su insiemi convessi o semplicemente connessi.

#### *Integrali doppi*

Integrale doppio di una funzione continua, formule di riduzione per regioni normali rispetto a un asse. Interpretazione geometrica dell'integrale doppio come volume di un solido. Cambiamento di variabili in un integrale doppio. Il teorema di Green nel piano; applicazioni.

#### *Testi consigliati:*

- T. Apostol. Calcolo, Vol. III. Boringhieri, Torino.
- A. Avantaggiati. Istituzioni di Matematica. Casa Editrice Ambrosiana, Milano.
- M. Bertsch. Istituzioni di Matematica. Boringhieri, Torino.
- F. Conti. Calcolo, teoria e applicazioni. McGraw-Hill, Milano.
- P. Marcellini e C. Sbordone. Calcolo. Liguori, Napoli.

#### **5A. CHIMICA ANALITICA (1° corso) (F11081)**

PROF. CARLO DOSSI

#### **5B. LABORATORIO DI CHIMICA ANALITICA (1° corso) (F11081)**



Il corso teorico e il corso di laboratorio risulteranno strettamente correlati, e si prefiggeranno lo scopo di introdurre lo studente alla teoria e alla pratica della chimica analitica quantitativa e delle tecniche strumentali elettroanalitiche.

Gli argomenti del corso riguarderanno i seguenti argomenti:

- elaborazione e trattamento statistico del dato analitico
- definizione e scelta del metodo analitico - standard e materiali di riferimento - metodiche di campionamento e di preparazione del campione per l'analisi
- trattamento esteso dell'equilibrio chimico sia in soluzione acquosa che in solventi non acquosi
- tecniche gravimetriche e termogravimetriche
- introduzione alle tecniche di separazione
- analisi volumetrica per titolazione; acido-base, redox, per precipitazione e per formazione di complessi
- metodi cinetici di analisi
- tecniche elettroanalitiche: conduttimetria, potenziometria, coulombometria, polarografia, voltammetria
- la strumentazione analitica: bilancia tecnica ed analitica, termobilancia, conduttimetro, potenziometro, polarografo
- le tecniche del laboratorio analitico; cenni alla classificazione e tossicità dei prodotti chimici; norme di sicurezza

Il laboratorio consisterà in una serie di esperienze pratiche in cui lo studente affronterà l'attacco e la dissoluzione di un campione, la determinazione qualitativa e quantitativa dei costituenti, ed il confronto fra diversi metodi analitici.

La discussione dei risultati ottenuti in laboratorio e delle tecniche sperimentali utilizzate costituiscono argomento della prova finale unitamente ad applicazioni di calcolo numerico relative alle metodologie analitiche sviluppate nel corso.

## **6A. FISICA GENERALE (2° corso) (F11006)**

PROF. LUCIANO MANDELLI

### *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  $B$ . Campo magnetico prodotto da correnti elettriche: legge di Biot-Savart, legge di Ampère-Laplace. Proprietà del vettore  $B$ . 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)<sub>es</sub>, (CGS)<sub>em</sub> 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 del 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 termoionico. 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>3em</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.

**6B. LABORATORIO DI FISICA GENERALE (F11006)**  
PROF. STEFANO RAGAZZI

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 a 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, connessioni 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 Kirchoff, 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.

**7. CALCOLO NUMERICO E PROGRAMMAZIONE (F11082)**

PROF.SSA FLAVIA DE TISI

Nozioni introduttive sugli errori. Tipi di errore. Propagazione degli errori. Stima e maggiorazione. Mal condizionamento, stabilità.

#### *Equazioni e sistemi lineari e non lineari*

Caso unidimensionale, metodi iterativi. Sistemi lineari. Metodi diretti e iterativi. Studio della convergenza e dell'errore. Inversione di matrice. Autovalori.

#### *Approssimazione di funzioni*

Sviluppo in serie di potenze, interpolazione, polinomi ortogonali, minimi quadrati: caso continuo caso discreto. Approssimazione razionale, funzioni splines, curve in forma parametrica, funzioni beta-splines. Cenno allo sviluppo in serie di Fourier. Studio dell'errore.

#### *Integrazione numerica*

Formule di quadratura, formule adattive. Soluzioni approssimate di un problema di Cauchy. Metodi ad uno o più passi, metodi predictor-corrector. Valutazione dell'errore, stabilità.

#### *Laboratorio di Calcolo*

Rappresentazione degli enti nell'elaboratore. Limitazioni ed attenzioni critiche nell'uso degli elaboratori. Uso di pacchetti applicativi tipo Matlab.

#### *Testi consigliati:*

A. Quarteroni: Elencati di Calcolo Numerico, Progetto Leonardo, Bologna.

V. Comencioni, Metodi Numerici e Statistici per le Scienze Applicate, Casa Editrice Ambrosiana, Milano.

### **8A. CHIMICA ORGANICA (1° corso) (F11008)**

PROF. FRANCO SANNICOLO

#### **IL LEGAME NELLE MOLECOLE ORGANICHE E LA LORO STRUTTURA**

Richiami: Struttura atomica, configurazione elettronica degli elementi, orbitali atomici, orbitali ibridi, elettronegatività, legame ionico e covalente,  $\sigma$  e  $\pi$ , energia di legame, orbitali molecolari, strutture delocalizzate, risonanza, acidi e basi di Brønsted e di Lewis, forze inter e intramolecolari, legame ad idrogeno, forze di van der Waals.

Struttura delle molecole organiche: criteri di scelta del modello e sua rappresentazione (*1 ora*)

#### **LE REAZIONI ORGANICHE**

Richiami: Basi termodinamiche e cinetiche, coordinata di reazione, costanti di equilibrio e velocità, energia di attivazione, catalizzatori, intermedi di reazione e stati di transizione.

Meccanismi fondamentali di reazione, omolisi e eterolisi dei legami covalenti, radicali, nucleofili, elettrofili, carbanioni e carbocationi, carbeni (*1 ora*)

#### **GRUPPI FUNZIONALI-CLASSI DI COMPOSTI ORGANICI-NOMENCLATURA IUPAC**

Breve descrizione dei gruppi funzionali fondamentali in chimica organica (*2 ore*)

#### **ALCANI**

Alcani a catena lineare, ramificata e ciclica; cicloalcani piccoli, medi e grandi e loro proprietà conformazionali, steriche e elettroniche.

#### Sintesi:

Fonti naturali, idrogenazione di alcheni e alchini, idrogenolisi di funzioni labili, riduzione della funzione carbonilica.

#### Reattività:

Alogenazione e principi generali delle reazioni radicaliche, ossidazione (combustione), pirolisi (*6 ore*)

#### **STEREOCHIMICA ORGANICA**

#### **STEREOCHIMICA STATICA**

Confronto esterno: isomeria.

Omomeri, isomeri costituzionali, stereoisomeri configurazionali, enantiomeri e diastereoisomeri.  
Chiralità (enantiomorfismo), condizioni per la chiralità, dissimmetria molecolare.  
Stereogenicità: elementi stereogenici, stereocentro e doppi legami.  
Prostereogenicità: elementi prostereogenici.  
Descrittori di stereogenicità e prostereogenicità: E, Z, R, S, Re, Si.  
Confronto interno: topismo. Omotopismo, eterotopismo costituzionale, stereoeterotopismo, enantiotopismo e diastereotopismo.

#### STEREOCHIMICA DINAMICA

Conformazioni e isomeri conformazionali (6 ore)

#### ALOGENOALCANI

Struttura e proprietà chimiche, classificazione e nomenclatura, proprietà fisiche.

##### Sintesi:

Da alcoli, per reazione con acidi alogenidrici, alogenuri di fosforo e cloruro di tionile.

##### Reattività:

Metallazione, composti di Grignard, litio alchili, cadmio alchili, cuprati. Scambio di metallo. Reazioni con aldeidi, chetoni, acidi, esteri, nitrili, alogenuri acilici, anidride carbonica, ossirani, alogenoalcani. Reazioni di sostituzione nucleofila; meccanismi  $S_N2$ ,  $S_N1$ ;  $S_{Ni}$ .

Reazioni di eliminazione; meccanismi  $E_2$ ,  $E_1$  e  $E_{1cB}$ . Prove cinetiche e stereochimiche dei diversi meccanismi; effetto del solvente; nucleofilia; abilità del gruppo uscente (6 ore)

#### ALCOLI E DIOLI

Struttura e proprietà chimiche, classificazione e nomenclatura, proprietà fisiche.

##### Sintesi:

Da aldeidi, chetoni, acidi carbossilici e loro derivati: riduzione con idruri metallici semplici e modificati.

Da alcheni: idratazione, idroborazione, ossimercuriazione, ossidazione (permanganato, tetrossido di osmio).

Per sostituzione nucleofila diretta o mediata.

Da ossirani.

##### Reattività:

Alcoli come nucleofili ed elettrofili. Ossidazione. Disidratazione. Trasposizione pinacolica (3 ore)

#### TIOLI

Struttura e proprietà chimiche, nomenclatura, proprietà fisiche.

##### Sintesi:

Per sostituzione nucleofila con derivati dell'idrogeno solforato.

##### Reattività:

Tioli come nucleofili. Ossidazione. Impiego degli 1,2- e 1,3-alcanditioli come ausiliari protettori della funzione carbonilica (2 ore)

#### ETERI E TIOETERI

Struttura e proprietà chimiche, nomenclatura, proprietà fisiche.

##### Sintesi:

Sintesi di Williamson, disidratazione intermolecolare di alcoli.

Reattività: Scissione acida; alchilazione, sali di osonio e di solfonio; ilidi di solfonio. Ossidazione, con speciale riferimento alla sintesi e alle proprietà di solfossidi e solfoni.

Cenno agli eteri corona (2 ore)

#### OSSIRANI

Struttura e proprietà chimiche, nomenclatura, proprietà fisiche.

##### Sintesi:

Da aloidrine; ossidazione degli alcheni con peracidi; da composti carbonilici e ilidi di solfonio. Stereospecificità delle

reazioni.

Reattività: Apertura acida; apertura riduttiva; apertura effettuata con composti organometallici. Regio e stereoselettività delle reazioni (2 ore)

#### ALCHENI, DIENI E TRIENI

Struttura e proprietà chimiche, classificazione, stereoisomeria e nomenclatura, proprietà fisiche. Sistemi ciclici insaturi. Cenno ai sistemi aromatici: condizioni per l'aromaticità e conseguenze sulla reattività. Sistemi aromatici carbociclici e eterociclici: pirrolo e piridina.

Sintesi:

Semi-idrogenazione degli alchini; reazione di composti carbonilici con ilidi di fosfonio (stabilizzate e non) e solfonio; eliminazione di Cope, di Hofmann e pirolisi degli esteri; dealogenazione.

Reattività:

Idrogenazione; addizione elettrofila di alogeni, acidi ipoalogenosi e carbocationi; addizione nucleofila a sistemi elettronpoveri; addizione radicalica. Regio e stereoselettività (specificità) delle reazioni.

Reattività speciale dei sistemi allilici e sua interpretazione sulla base della delocalizzazione elettronica degli allil-cationi, anioni e radicali: cinesostituzione  $S_{N2}$ . Equivalenti degli allilanioni: enoleteri e enammine.

Dieni e trieni: regioselettività delle addizioni. Cicloaddizioni [2+2] e [4+2]; Diels-Alder e cicloaddizioni 1,3-dipolari. Cenni alle reazioni di elettrocicizzazione.

Cenno ai cumuleni: alleni. Configurazione elettronica, Asse stereogenico degli alleni chirali.

Reazioni di polimerizzazione: cationica, anionica e radicalica. Cenno ai materiali polimerici di impiego più comune (6 ore)

#### ALCHINI

Struttura e proprietà chimiche, nomenclatura, proprietà fisiche.

Sintesi:

Doppia eliminazione; preparazione e reattività degli alogenuri vinilici. Reazione degli acetiluri con elettrofilo.

Reattività:

Riduzione con metalli. Addizioni elettrofile: confronto delle stesse reazioni effettuate sugli alcheni. Ossidazione: epossidazione e accoppiamento ossidativo (3 ore)

#### ALDEIDI E CHETONI

Struttura e proprietà chimiche, nomenclatura, proprietà fisiche. Enoli e enolati.

Sintesi:

Ossidazione: ozonizzazione degli alcheni. Reazioni di composti organometallici e idruri modificati con esteri e ammidi. Alchilazione di anioni di 1,3-ditiani. Reazione di alogenuri acilici con diazometano. Decarbossilazione di -chetoacidi; sintesi malonica.

Reattività:

Reazioni con nucleofili:

Nucleofili al carbonio: condensazione con gruppi metilenici attivi, reazione di Knoevenagel, composti organometallici, ilidi, diazometano, acido cianidrico; condensazione aldolica, di Claisen e benzoinica.

Nucleofili all'ossigeno, all'azoto e allo zolfo: formazione di (emi) (tio) acetali e chetali, immine e enammine, idrazoni, ossime, semicarbazoni, composti di Bertagnini.

Reazioni con elettrofilo:

Alogenazione in ambiente acido e basico.

Reazioni di riduzione: Clemensen, Wolff-Kishner, Huang-Minlon; riduzione monoelettronica a pinacoli.

Reazioni di ossidazione: Baeyer-Villiger (7 ore)

#### COMPOSTI CARBONILICI MASCHERATI

Sintesi

(emi)-Acetali, (emi)-chetali e corrispondenti funzioni solforate; (emi)-aminali; enammine; enoleteri.

Reattività

Protezione della funzione carbonilica; addizione elettrofila; inversione di polarità della funzione carbonilica (1 ora)

## COMPOSTI CARBONILICI ,-INSATURI

Struttura e proprietà chimiche, nomenclatura.

### Sintesi

Deidroalogenazione di alogenoderivati; reazione di Wittig con ilidi stabilizzate; ossidazione di alcoli allilici; isomerizzazione di ,-enoni.

### Reattività

Idrogenazione; riduzione monoelettronica. Addizioni nucleofile: regioselettività, addizioni coniugate, addizioni di carbanioni, addizioni di Michael e anellazione di Robinson. Addizioni elettrofile (2 ore)

## AMMINE

Struttura, classificazione, nomenclatura, proprietà chimiche, basicità, proprietà fisiche.

### Sintesi:

Alchilazione dell'ammoniaca; sintesi di Gabriel; amminazione riducente di aldeidi e chetoni; riduzione di alchilazidi, nitrili, ammidi e ossime; demolizione di Hofmann, Curtius e Schmidt.

### Reattività

Reazioni con elettrofili; metilazione esauriente e eliminazione di Hofmann; reazione di Mannich; reazione con acido nitroso; ossidazione delle ammine terziarie (4 ore)

## ACIDI CARBOSSILICI

Struttura, nomenclatura, proprietà chimiche, acidità, proprietà fisiche.

### Sintesi:

Idrolisi dei derivati degli acidi carbossilici; sintesi malonica; ossidazione di alcani, alcheni, alcoli, aldeidi e chetoni; reazione dell'aloformio dei metilchetoni; carbonatazione di composti organometallici; reazione di Cannizzaro; trasposizione benzilica.

### Reattività

Formazione di cloruri acilici e anidridi; formazione di esteri e lattoni; reazione di Hunsdiecker; reazione di Arndt-Eistert; reazione di Hell-Volhard-Zelinsky; reazione di Kolbe; reazione con litioalchili; reazioni degli enolati degli acidi carbossilici; riduzione ad alcoli (3 ore)

## ESTERI E LATTONI

Struttura, nomenclatura, proprietà chimiche, proprietà fisiche.

### Sintesi:

Esterificazione diretta di acidi carbossilici; alchilazione dei sali alcalini degli acidi carbossilici; reazione degli acidi carbossilici con diazometano; da cloruri acilici e anidridi; da nitrili, attraverso gli iminoeteri; ossidazione di aldeidi e chetoni.

### Reattività

Idrolisi e saponificazione; transesterificazione; amminazione; reazione con composti organometallici; riduzione con idruri metallici semplici e modificati; enolati e loro reazioni (2 ore)

## AMMIDI, LATTAMI E IMMIDI

Struttura, classificazione, nomenclatura, proprietà chimiche, acidità e basicità, proprietà fisiche.

### Sintesi:

Dagli acidi carbossilici e loro derivati per reazione con ammoniaca e suoi derivati; trasposizione di Beckmann delle ossime.

### Reattività

Idrolisi acida e alcalina; riduzione con idruri metallici; reazioni di ammidati e enolati; demolizione di Hofmann; formazione di imidocloruri (1 ora)

## NITRILI

Struttura, nomenclatura, proprietà chimiche, acidità e basicità, proprietà fisiche.

### Sintesi:

Disidratazione di ammidi primarie e ossime; alchilazione dei cianuri.

### Reattività

Idrolisi acida e alcalina; reazioni con composti organometallici, riduzione con idruri metallici semplici e modificati, idrogenazione catalitica; formazione di imminoeteri (*1 ora*)

#### CLORURI ACILICI, ANIDRIDI E CHETENI

##### Sintesi e reattività:

Vedi sopra; preparazione e utilizzo delle anidridi miste; preparazione dei cheteni come tali e come intermedi di reazione (*1 ora*)

### **8B. LABORATORIO DI CHIMICA ORGANICA (1° corso) A e B (F11008)**

Il corso è semestrale e articolato in due fasi distinte:

- a) Ciclo di lezioni teoriche
- b) 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.

L.M. Harwood, cj Moody, Experimental Organic Chemistry, Ed: Blackwell Scientific Publications

#### *Libri consigliati per la consultazione*

Vogel, Chimica Organica Pratica ed Ambrosiana.

G. Poli, G. Giambastiani, Chimica Organica dalla Teoria alla Pratica, Ghedini Libraio (Milano).

### **9A. CHIMICA FISICA (1° corso) (F11083)**

PROF. GIAN FRANCO TANTARDINI

*Fondamenti e applicazioni di teoria quantistica* - Origini della meccanica quantistica; equazione di Schrödinger; funzione d'onda e interpretazione di Born; osservabili e operatori; principio di sovrapposizione e valori di aspettazione; principio d'indeterminazione; moto traslazionale; tunnelling; oscillatore armonico; moto rotazionale; momento angolare orbitale e di spin.

*Struttura atomica e spettri atomici* - Atomi idrogenoidi; orbitali atomici; transizioni spettroscopiche e regole di



selezione; atomi polielettronici; approssimazione orbitale; principio di aufbau e di Pauli; spettri di atomi polielettronici; stati di singoletto e di tripletto; accoppiamento spin-orbita; termini spettroscopici e regole di selezione; effetto Zeeman.

*Struttura molecolare e simmetria* - Approssimazione di Born-Oppenheimer; teoria del legame di valenza; molecola di idrogeno; molecole biatomiche omonucleari; orbitali; ibridi; molecole poliatomiche; teoria dell'orbitale molecolare; principio variazionale; diagrammi di Walsh; molecole coniugate; metodo di Hückel; solidi e teoria delle bande; operazioni di simmetria, gruppi di simmetria, rappresentazioni, tabelle dei caratteri.

*Spettri rotazionali e vibrazionali* - Tecniche sperimentali; intensità e ampiezza delle righe spettrali; livelli di energia rotazionale; transizioni rotazionali; spettri Raman rotazionali; vibrazioni di molecole biatomiche e spettri vibrazionali; spettri roto-vibrazionali; molecole poliatomiche; modi normali di vibrazione e spettri vibrazionali; spettri Raman vibrazionali.

*Spettri elettronici* - Transizioni elettroniche; struttura vibrazionale; fluorescenza e fosforescenza; dissociazione e pre-dissociazione; lasers; spettroscopia fotoelettronica: UPS, XPS, ESCA.

*Testo consigliato:*

P.W. Atkins, "Physical Chemistry", Oxford University Press, VI edizione, 1998.

## **9B. LABORATORIO DI CHIMICA FISICA (1° corso) (F11084)**

PROF. PAOLO LONGHI

*Proprietà dei gas*

Miscela di gas, Gas ideali e reali, Equazione di Van der Waals, Fattore di compressibilità.

*Primo principio della Termodinamica*

Funzioni di stato, Energia interna, Lavoro e calore.

*Termochimica*

Variazione di entalpia di reazione.

*Secondo principio della Termodinamica*

Entropia, Variazioni di entropia in un sistema, variazione di entropia dell'universo. Processi reversibili e irreversibili, macchine termiche e frigorifere, funzione di Helmholtz e di Gibbs.

*Terzo Principio della termodinamica*

Equazioni di Maxwell, Potenziale chimico di un gas perfetto, fugacità, stati standard dei gas reali, Sistemi aperti.

*Cambiamento di stato*

Stabilità delle fasi, equilibri di fase e diagrammi di stato. Curve di equilibrio solido-liquido, solido-vapore e liquido-vapore.

*Reazioni chimiche*

Energia libera di reazione, costante di equilibrio.

*Miscela*

Quantità parziali molari, funzione di mescolamento di Gibbs, potenziali chimici dei liquidi, Legge di Raoult, Legge di Henry, proprietà colligative (aumento del punto di ebollizione, diminuzione della temperatura di congelamento, solubilità).

*Testi consigliati*

Physical Chemistry P.W. Atkins, Vª Edizione 1994.

**10A. CHIMICA INORGANICA (1° corso) (F11010)**  
PROF. GIANFRANCO CIANI

**Struttura (35 ORE)**

– *Struttura atomica(6 ore)*: Principi di meccanica quantistica. Atomi idrogenoidi. Orbitali atomici. Atomi e molti elettroni. Schermatura e penetrazione.  $Z_{\text{eff}}$  e regole di Slater Aufbau. Principio di Pauli e regole di Hund. Configurazioni elettroniche. Accoppiamento di Russel-Saunders e termini atomici e ionici. Parametri atomici. Raggi atomici e ionici. Energie di ionizzazione. VSIE. Affinità elettroniche. Potenziale atomico in funzione della carica. Definizioni di elettronegatività. Carattere hard-soft.

– *Introduzione al legame chimico*: Doppie di Lewis. Risonanza. Ipervalenza. Geometria molecolare e teoria VSEPR. Simmetria molecolare: gruppi puntuali, rappresentazioni, tabelle dei caratteri e loro applicazioni.

– *Legame covalente*: Teoria Valence Bond (VB). Metodo degli orbitali molecolari (MO-LCAO). Molecole biatomiche. Molecole poliatomiche e orbitali di simmetria (SALC). Metodo di Hückel in sistemi inorganici. Ibridizzazione. Diagrammi di Walsh. Cenno al metodo Extended Hückel (EHT). Proprietà delle molecole covalenti: ordine di legame, distanze di legame ed energie di legame. Andamenti periodici. Contributi  $\sigma$  e  $\pi$ . Ibridizzazioni intermedie e regola di Bent. Flusionalità.

– *Stato solido e legame ionico*: Struttura cristallina. Cella unitaria. Reticoli. Sistemi cristallini. Gruppi spaziali. Tipi di solidi. Impacchettamenti di sfere: compatti (fcc, hcp), bcc e meno compatti. Cavità interstiziali. Metalli, leghe e composti intermetallici. Solidi ionici. Strutture prototipiche. Razionalizzazioni nel modello ionico: rapporto dei raggi, mappe strutturali. Entalpie reticolari. Ciclo di Born-Haber. Costante di Madelung. Equazioni di Born-Mayer e Born-Landè. Equazione di Kapustinkii. Applicazioni termodinamiche.

Legame nei solidi. Modello dell'elettrone libero nei metalli. Teoria delle bande. Livello di Fermi. Densità degli stati. Conduttività elettrica. Solidi monodimensionali e distorsioni di Peierls. Isolanti. Semiconduttori intrinseci. Gap di banda. Semiconduttori estrinseci di tipo  $p$  ed  $n$ . Celle fotovoltaiche. Composti semiconduttori.

**Reattività (10 ore)**

– *Teorie acido-base*: Definizioni. Acidità di Brønsted. Mobilità degli ioni idrogeno in acqua. Acidi e basi coniugati. Affinità protonica. Effetto livellante del solvente e discriminazione. Superacidi. Andamenti periodici per gli acidi di Brønsted. Forza degli acidi e delle basi (effetti sterici ed elettronici). Ossoacidi e regole di Pauling. Carattere anfotero. Policationi e poliossoanioni. Acidità di Lewis: esempi. Reazioni degli acidi di Lewis. Teoria HSAB. Parametri termodinamici di acidità: equazione di Drago-Wayland.

– *Ossidoriduzioni*: Estrazione degli elementi. Diagrammi di Ellingha. Potenziali redox. Equazione di Nernst. Fattori cinetici. Sovratensioni. Trasferimento di elettroni: meccanismo della sfera esterna e della sfera interna. Elettroni in soluzione. Stabilità redox in acqua. Presentazione diagrammatica dei potenziali. Diagrammi di Latimer. Volt-equivalenti. Diagrammi di Frost.

**Chimica sistematica degli elementi tipici (15 ore)**

– *Idrogeno e suoi composti*: L'elemento. Effetti isotopici. Preparazione, proprietà e reazioni. Idruri metallici. Composti binari elettron-deficienti, -precisi e -ricchi. Acqua e ghiaccio. Legami a idrogeno. Clatrati idrati.

– *I gruppi del boro e del carbonio*: Boro elementare. Alogenuri. Ossidi e ossoanioni. Composti con l'azoto: nitruro, borazine. Cluster di boro: boruri metallici, borani e boroidruri, carborani. Regole di Wade. Carbonio elementare: diamante, grafite, fullereni, carbonio parzialmente cristallino. Alogenuri. Ossidi. Carburi e composti di intercalazione. Silicio e suoi composti. Silicati. Setacci molecolari e Zeoliti. Siliciuri.

– *I gruppi dell'azoto e dell'ossigeno*: Gruppo dell'azoto: gli elementi. Attivazione dell'azoto. Sintesi dell'ammoniaca. Alogenuri degli elementi. Ossidi e ossoanioni dell'azoto e chimica redox in soluzione. Idrazina e idrossilammina. Ossidi e ossoanioni del fosforo. Composti del fosforo con l'azoto. Ossigeno tripletto e singoletto. Zolfo elementare. Alogenuri degli elementi. Ossidi e ossoanioni dello zolfo. Ossidi, perossidi, superossidi e ozonuri metallici. Composti a catene, anelli e gabbie del blocco  $p$ .

– *Alogeni e gas nobili*: Proprietà e preparazione degli alogeni. Specificità del fluoro. Composti interalogeni. Ossoacidi e ossoanioni. Proprietà redox. Gas nobili e loro composti.

**Chimica dei composti di coordinazione (10 ore)**

- Caratteristiche generali dei metalli di transizione
- Struttura e isomeria dei complessi
- Legame chimico: Teoria del campo cristallino, campo dei leganti e metodo MO.
- Spettri elettronici e proprietà magnetiche dei complessi

*Testi consigliati:*

D.F. Shriver, P.W. Atkins, C.H. Langford, "Inorganic Chemistry", 2° Edition, Oxford University Press;

*Testi da consultare:*

J.E. Huheey, "Inorganic chemistry", 3° Edition, Harper Collins Publishers;  
F.A. Cotton, G. Wilkinson, "Advanced inorganic chemistry", 4° Edition, John Wiley & Sons.  
N.N. Greenwood, A. Earnshaw, "Chemistry of the elements", Pergamon;  
A.F. Wells, "Structural Inorganic chemistry", Clarendon Press.

**10B. LABORATORIO DI CHIMICA INORGANICA (1° corso) A e B (F11010)**

PROF. ALESSANDRO CERIOTTI, PROF. ALESSANDRO PASINI

Il corso è articolato in:

**a) lezioni teoriche in aula** (ca.25 ore).

Il ciclo di lezioni riprende alcuni aspetti della chimica degli elementi, già trattati nel corso di Chimica Inorganica (1° corso) (Prof. Gianfranco Ciani), esemplificando con l'ausilio di esercizi i seguenti argomenti:

- carica nucleare effettiva, raggi covalenti e metallici, raggi di Van der Waals, raggi ionici, potenziale di ionizzazione ed affinità elettronica, elettronegatività e polarizzazione, hardness e softness,
- energie di legame covalente e correlazioni con l'ordine di legame e la distanza di legame,
- teoria VSEPR e previsione della geometria molecolare,
- simmetria molecolare e gruppi puntuali,
- reticoli metallici e reticoli ionici,
- proprietà molecolari di composti contenenti elementi del II periodo e del III periodo,
- reazioni acido-base,
- reazioni redox.

In una seconda fase vengono ripresi alcuni aspetti riguardanti i complessi dei metalli di transizione. Durante le lezioni vengono illustrati gli aspetti teorici riguardanti le esperienze di laboratorio.

**b) esercitazioni pratiche in laboratorio** (ca.50 ore).

Le esercitazioni vertono su alcune preparazioni inorganiche selezionate di volta in volta in modo da applicare le principali tecniche di sintesi, separazione e purificazione e in modo da sottolineare gli aspetti più significativi delle proprietà e del comportamento chimico di alcuni elementi non di transizione e di alcuni metalli di transizione.

Le sintesi scelte esemplificano: stati di ossidazione degli elementi, tipi di leganti, modi di coordinazione, effetto chelante, isomeria geometrica, isomeria di legame, isomeria ottica.

*Testi consigliati:*

D.F.Shriver, P.W.Atkins, C.H.Langford - *INORGANIC CHEMISTRY* - 2nd ed. - Ed.Oxford Univ.Press (1994).

**11A. CHIMICA FISICA (2° corso) (F11011)**  
PROF. LEONARDO FORMARO

*Termodinamica statistica*

Configurazioni, Funzioni peso e funzione di peso massimo. Distribuzione di Boltzmann. Energia interna e funzione di partizione. Entropia.

Sistemi di particelle interagenti. Insiemi canonici. Funzioni di partizione canonica.

Relazioni tra funzioni di stato della termodinamica classica e quelle della termodinamica statistica. Contributi traslazionali, vibrazionali, rotazionali ed elettronici. Energie medie per i diversi modi di moto. Capacità termica. Teorema di equipartizione dell'energia.

Costanti di equilibrio di reazioni chimiche. Teoria del complesso attivato per reazioni in fase gas e in soluzione. Determinazione dei parametri termodinamici del complesso attivato.

*Proprietà Elettrostatiche di Molecole e di Corpi Macroscopici*

Dipoli permanenti e indotti. Polarizzabilità e Permittività. Equazioni di Clausius-Mossotti e di Debye.

Energia di Interazione tra dipoli. Potenziale di interazione di London e Lennard-Jones. Estensione a interazioni di corpi macroscopici. Stabilità di sistemi colloidali. Equazione di Hamaker.

*Adsorbimento*

Interazioni Gas-Solido. Isotherme fenomenologiche. Grado di ricoprimento. Isotherme modello: Langmuir, Temkin e Freundlich. Determinazione del Calore di adsorbimento e della sua variazione col grado di ricoprimento.

*Soluzioni Elettrolitiche*

Solvatazione. Termodinamica delle soluzioni. Potenziale chimico. Soluzioni di elettroliti. Stato di riferimento e coefficienti di attività. Modello di Debye-Hückel. Termodinamica elettrochimica. Determinazione di funzioni di stato termodinamiche da misure su sistemi elettrochimici. Determinazione dei coefficienti di attività di soluzioni. Energia libera di formazione di ioni singoli.

*Testi Consigliati*

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

**11B. LABORATORIO DI CHIMICA FISICA (2° corso) A e B (F11011)**  
PROF. RICCARDO DESTRO

*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 rilassamento

*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, oppure cinetica di trasferimento elettronico e di trasferimento di materia.

**12A. CHIMICA ORGANICA (2° corso) (F11012)**

PROF.SSA LUISA GARANTI

*Sistemi aromatici carbociclici*

Benzene: aromaticità, risonanza, regole di Hückel. Sistemi aromatici non benzenoidi, sistemi antiaromatici. reazioni con stati di transizione aromatici. Sistemi aromatici policiclici. Nomenclatura (5 ore)

*Sostituzione elettrofila aromatica*

Meccanismo. Reazioni di protonazione, alogenazione, nitrurazione, solfonazione, reazioni di Friedel-Crafts. Orientamento nelle poli-sostituzioni, fattori parziali di velocità (7 ore)

*Sostituzioni nucleofile aromatiche*

Meccanismi operanti nelle sostituzioni nucleofile aromatiche: addizione-eliminazione ed eliminazione-addizione (3 ore)

*Derivati aromatici*

Areni, alogenoderivati, metalloarili, nitroderivati, ammine, sali di diazonio, fenoli, acidi arilsolfonici, aldeidi, acidi carbossilici e cenni sulle correlazioni extratermodinamiche, chinoni (14 ore).  
arilalifatici. Chinoni.

*Sistemi eterociclici*

Anelli etrociclici a tre, quattro, cinque termini. Anelli eteroaromatici a cinque termini: furano, pirrolo, tiofene, inidazolo, ossazolo e loro sistemi benzocondensati. Anelli teroaromatici a sei termini: piridina, chinolina, isochinolina, diazine, basi puriniche. Derivati di interesse biologico contenenti anelli eterociclici. Alcaloidi (15 ore)

#### *Amminoacidi, peptidi e proteine*

Struttura, proprietà, sintesi e reattività degli amminoacidi. Determinazione della struttura di peptidi e loro sintesi. Proteine (6 ore)

#### *Carboidrati*

Monosaccaridi, stereochimica e notazioni configurazionali. Anomerismo. Glicosidi. Reazioni dei monosaccaridi: formazione di eteri, esteri, riduzione, ossidazione, allungamento della catena, accorciamento della catena. Dimostrazione di Fischer. Disaccaridi, polisaccaridi (5 ore)

#### *Polichetidi*

Lipidi, terpeni e steroidi, eicosanoidi (3 ore)

#### *Reazioni pericicliche*

Cicloaddizioni: Diels-Adler, [2+2], 1,3 dipolari. Reazioni elettrocicliche. reazioni sigmatropiche (3 ore).

*Testi consigliati:* A. Streitwieser Jr., C. Heathcock, E.Kosower, *Chimica Organica*, Edises, Napoli, 1995. S. Ege, *Chimica Organica*, Edizioni Sorbona, Milano, 1994. W.H. Brown, *Chimica Organica*, EdiSES, Napoli, 1996.

### **12B. LABORATORIO DI CHIMICA ORGANICA (2° corso) A e B (F11012)**

Il corso ha lo scopo di verificare sperimentalmente quanto appreso in via teorica nei Corsi di Chimica Organica (1° e 2° corso). Sarà articolato in 15-20 lezioni nelle quali verrà richiamata la reattività dei gruppi funzionali più comuni e da almeno 60 ore di sperimentazione a banco singolo. Il lavoro sperimentale consiste nello studio di alcuni composti organici, diversi per ciascuno studente, che dovranno essere esaminati per via chimica e spettroscopica al fine di riconoscerne il gruppo funzionale. Questi substrati saranno quindi utilizzati come prodotti di partenza per la sintesi di altri prodotti sfruttando alcune reazioni tipiche della funzionalità individuata scelta fra un "pool" di reazioni consigliate. Allo studente verrà data la possibilità di scegliere, previa discussione con il docente, le reazioni che ritiene più adatte e le modalità di esecuzione delle stesse. Dopo aver acquisito una certa autonomia di lavoro, ogni studente dovrà dar prova di saper modulare le condizioni di reazione anche su substrati bifunzionali. In seguito dovrà esaminare miscele di due composti organici incogniti, diverse per ciascuno studente, che dovranno essere separate utilizzando la tecnica di separazione più opportuna (cristallizzazione, estrazione con solventi, distillazione frazionata a pressione ambiente e ridotta, cromatografia, ecc.). I due prodotti purificati dovranno essere riconosciuti utilizzando le conoscenze acquisite nella prima parte del corso.

Le classi di composti studiati saranno: ammine primarie, secondarie e terziarie, aldeidi, chetoni, acidi carbossilici, alcoli, fenoli, esteri, ammidi, nitrili, eteri, alogenoderivati. nitroderivati. idrocarburi.

#### *Libri consigliati per la consultazione*

Vogel, "Chimica Organica Pratica", Ed. Ambrosiana.

R. Morassi, G.P. Speroni, *Il Laboratorio Chimico*, Ed. Piccin.

### **13A. CHIMICA ANALITICA 2° corso (F11087)**

PROF. FRANCESCO CARIATI

#### Programma delle lezioni

##### *Introduzione alla spettroscopia (6 ore)*

Livelli energetici e spettroscopia. Caratteristiche della radiazione. Regioni dello spettro e tipi di spettroscopia. Regole di selezione delle transizioni spettroscopiche. Cenni di teoria dei gruppi puntuali. Regola di selezione di simmetria.

##### *La spettroscopia atomica di emissione e di assorbimento (5 ore)*

Cenni di spettroscopia di assorbimento con fiamma o con fornetto di grafite. Spettroscopia di emissione con plasma. Descrizione della strumentazione.

*La spettroscopia vibrazionale (10 ore)*

Cenni sulle vibrazioni molecolari. Spettroscopia IR in dispersione. Regole di selezione. Spettroscopia IR in Trasformata in Fourier. Spettroscopia Raman. Regole di selezione. Spettroscopia di Risonanza Raman. Descrizione della strumentazione.

*La spettroscopia elettronica (6 ore)*

La spettroscopia visibile e ultravioletta. Regole di selezione. Interazioni vibroniche. Descrizione di alcuni cromofori. Spettri elettronici dei composti organici e dei composti di coordinazione. Transizioni d-d. Fotoluminescenza Principi e funzionamento dei laser. Polarimetria, dispersione ottica rotatoria e dicroismo circolare.

*La risonanza nucleare magnetica (10 ore)*

Cenni alle proprietà magnetiche nucleari. Effetto Zeeman nucleare. Regole di selezione della spettroscopia NMR. Spettroscopia NMR in Trasformata di Fourier e bidimensionale.

*La spettroscopia di risonanza di spin elettronico (3 ore)*

Cenni alle proprietà magnetiche dello spin elettronico. Effetto Zeeman elettronico. Regole di selezione della spettroscopia ESR. Spettroscopia ENDOR. Descrizione della strumentazione.

*La spettrometria di massa (4 ore)*

Principio fisico del metodo. Fattori che regolano la stabilità degli ioni e meccanismi di frammentazione. Spettrometria per bombardamento con atomi veloci. Spettrometria di massa con l'impiego di laser. Descrizione della strumentazione.

*La spettroscopia di fotoelettroni (7 ore)*

Principi generali. I processi di fotoemissione ESCA e UPES. Spettri Auger. Tecniche spettroscopiche utilizzate nelle analisi di superfici. Descrizione della strumentazione.

*Microscopia elettronica (2 ore)*

*Le spettroscopie di raggi X (6 ore)*

Fluorescenza. Assorbimento. AEFS. EXAFS. Spettri di diffrazione di polveri. Descrizione della strumentazione.

*La spettroscopia Mossbauer (3 ore)*

Principi generali. Lo spostamento isomerico. La scissione di quadruplo. La scissione magnetica. Regole di selezione. Descrizione della strumentazione. Il corso è costituito da lezioni di teoria e da esercitazioni di gruppo.

*Metodi termici di analisi (2 ore)*

*Esercitazioni pratiche (6 ore)*

**13B. LABORATORIO DI CHIMICA ANALITICA 2° corso (F11087)**

PROF. G.M. ZANDERIGHI

*Strumentazione in chimica analitica*

Strumento di misura e suoi principali elementi costitutivi. Generatore di segnale, segnale analitico e trasduttore. Schema a blocchi di uno strumento.

Cifre di merito di una risposta strumentale. Scelta del metodo analitico in funzione di accuratezza, precisione e limite di rilevabilità richiesti. Interpretazione della misura.

Cenni sui circuiti elettrici, elettronici e loro principali componenti. Amplificatori operazionali e loro impiego nella strumentazione analitica. Elettronica digitale, microprocessori ed elaboratori.

Rapporto segnale/rumore nella risposta strumentale. Sorgenti di rumore. Dispositivi strumentali e metodi di elaborazione del segnale per la riduzione del rumore.

Prestazioni strumentali in funzione delle caratteristiche dei suoi componenti. Esempio di strumenti per spettroscopia ottica: sorgenti di radiazioni, selettori di lunghezza d'onda, rivelatori, elaboratori di segnali e rappresentazione della risposta strumentale. Modelli di disposizioni strumentali: temporali, spaziali e multiplex.

#### *Voltammetria*

Segnali di eccitazione.

Voltammetria a scansione lineare: strumentazione e microelettrodi, voltammogramma, voltammetria idrodinamica.

Applicazioni: rivelatori e sensori voltammetrici, titolazioni amperometriche.

Polarografia: polarogramma, metodi a campionamento di corrente. Applicazioni.

Metodi polarografici e voltammetrici ad impulso: impulso differenziale ed a onda quadra. Caratteristiche della risposta. Applicazioni.

Metodi di ridissoluzione e di adsorbimento e ridissoluzione. Applicazioni.

Voltammetria ciclica. Applicazioni.

#### *Tecniche cromatografiche*

##### *Aspetti generali della separazione analitica*

Introduzione alle separazioni analitiche. Precipitazione. Formazione di complessi. Distribuzione tra solventi, influenza del pH, estrazione con chelanti.

Distribuzione in controcorrente come modello di separazione in continuo. Distribuzione teorica, separazione, spostamento dei picchi di concentrazione, larghezza di banda, risoluzione. Modello di separazione cromatografica.

Definizione e classificazione dei principali metodi di separazione cromatografica (adsorbimento, ripartizione, scambio ionico, esclusione, affinità).

Aspetti cinetici della separazione: teoria della velocità di migrazione, allargamento di banda ed efficienza della colonna.

Aspetti termodinamici della separazione: interazioni ioniche e molecolari, fasi mobili e stazionarie. Funzionalizzazione degli analiti in cromatografia: obiettivi e tecniche. Risoluzione e ottimizzazione della separazione.

#### *Rivelatori*

Caratteristiche generali. Classificazione in funzione del tipo di risposta: proporzionale alla massa o alla concentrazione.

Principali rivelatori usati in cromatografia: TCD, FID, ECD, UV-VIS, indice di rifrazione, elettrochimici. Altri rivelatori.

Tecniche analitiche accoppiate. Interfacciamento del cromatografo con spettrometro di massa ed FTIR.

##### *Applicazioni qualitative e quantitative delle tecniche cromatografiche*

Parametri di ritenzione. Metodi qualitativi chimici e strumentali.

Metodi quantitativi: taratura diretta, fattori di correzione, standard interno; metodo delle aggiunte.

#### *Gascromatografia (GC)*

Strumentazione: iniettori, colonne, fasi stazionarie, rilevatori. Influenza della temperatura. Applicazioni.

#### *Cromatografia liquida (HPLC)*

Strumentazione: fasi mobili, sistemi di pompaggio, campionamento, colonne, fasi stazionarie, rilevatori.

Classificazione dei metodi, meccanismi di separazione e fattori che li influenzano: cromatografia di ripartizione, adsorbimento, scambio ionico, esclusione, di affinità. Fasi mobili e stazionarie.

Ottimizzazione delle separazioni: scelta della fase mobile in funzione della forza eluente, indice di polarità di Snyder ( $P'$ )- Eluizione isocratica e in gradiente. Applicazioni.

#### *Cromatografia in fase supercritica (SCF)*

Fluidi supercritici: caratteristiche; applicazioni generali e alle separazioni cromatografiche

Strumentazione: caratteristiche e rivelatori.

Eluizione a pressione costante e con gradiente di pressione. Applicazioni.

#### *Esercitazioni di laboratorio*

Scopo delle esercitazioni di laboratorio è di fornire agli studenti gli strumenti critici per poter eseguire ed interpretare una determinazione analitica, anche sulla base delle nozioni acquisite nei corsi di Chimica analitica I e II. Verranno considerate problematiche analitiche strumentali applicate anche a campioni reali, la rappresentazione e la discussione



dei risultati, il confronto tra dati ottenuti con metodi e/o tecniche diverse.

In particolare saranno applicati metodi potenziometrici, conduttimetrici, voltammetrici, spettroscopici e cromatografici per determinazioni quali e quantitative.

La discussione dei risultati ottenuti, delle tecniche sperimentali utilizzate, delle applicazioni di calcolo numerico relative alle metodologie analitiche, sviluppate nel corso costituiscono argomento della valutazione finale.

*Testo consigliato:*

Skogg, Leary, Chimica Analitica Strumentale, EdiSES, 1995 (da 4<sup>a</sup> ed. inglese, 1992)

*Testi di consultazione*

Sawyer, Heineman, Beebe. Chemistry Experiments for Instrumental Methods, Wiley, 1984

Miller, Miller, Statistics for Analytical Chemistry. Ellis Horwood, 1994 (4<sup>a</sup> ed.)

Miller, Chromatography, Wiley, 1988

Willard, Merrit, Dean, Settle, Instrumental Methods of Analysis, Wadsworth, 1988 (7<sup>a</sup> ed.)

Strobel, Heineman, Chemica Instrumentation: a Systematic Approach, Wiley, 1989 (3<sup>a</sup> ed.)

Ugo, *Analisi Chimica Strumentale*, Editrice Scientifica, 1980 (ristampa 1992)

#### **14. CHIMICA BIOLOGICA (1° corso) (F11014)**

*Introduzione*

Scopo e campi di studio della biochimica. La cellula come unità fondamentale dei processi chimici negli organismi viventi. Bioelementi e biomolecole. Il ruolo dell'acqua nei processi biologici.

*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.

*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. Alcuni esempi di proteine catalitiche: lisozima, proteasi seriniche, carbosipeptidasi, glutazione riduttasi. Ribozima ed anticorpi catalitici.

*Membrane biologiche*

Struttura e funzione. Cenni sul trasporto di membrana.

*Metabolismo*

Aspetti generali e metodi di studio.

*Aspetti termodinamici dei processi biologici* I fosfo-composti ad alto contenuto energetico. L'ATP ed i composti ad alto potenziale di trasferimento di gruppo.

*Metabolismo dei carboidrati*

Glicolisi e fermentazione alcolica. Regolazione della glicolisi. Processi ossidativi: ossidazione del piruvato, ciclo dell'acido citrico, vie anaerobiche, ciclo del glicossilato. Metabolismo dei pentoso fosfati. Biosintesi dei carboidrati: gluconeogenesi e sua regolazione, cicli futili. Metabolismo del glicogeno e controllo ormonale. Ciclo del carbonio e fotosintesi.

*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. Cenni sul metabolismo dei fosfolipidi e del colesterolo.

#### *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*

Struttura dei vari tipi di DNA e RNA. I livelli di organizzazione strutturale del DNA.

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*

Il codice genetico. Il processo di traduzione. Meccanismi di inibizione e di regolazione del processo di traduzione. Modificazioni post-traduzionali.

#### *Espressione genica*

Alcuni aspetti dei meccanismi di regolazione dell'espressione genica.

#### *Testi consigliati*

D. Voet, J.G. Voet, BIOCHIMICA, 1993, Zanichelli, Bologna.

J.D. Rawn, BIOCHIMICA, 1ª ed., 1990, McGraw-Hill Libri Italia, Milano.

R.M. Abeles, P.A. Frey, W.P. Jencks, BIOCHIMICA, 1994, Piccin, Padova.

### **15. PROVA DELLA CONOSCENZA DELLA LINGUA INGLESE (F11015)**

PROFF. ARDIZZONE, DOSSI

Non si tratta di un corso ma di una prova pratica che si conclude, in caso positivo, con un giudizio (approvato) e non con un voto.

Il superamento di questo esame è necessario per poter sostenere alla fine degli studi l'esame di laurea: infatti il Nuovo Ordinamento prevede che per laurearsi lo studente debba aver superato almeno 25 esami e la Prova della Lingua Inglese.

## INSEGNAMENTI OPZIONALI

### 15.1. CHIMICA COMPUTAZIONALE (F11022)

PROF. DEMETRIO PITEA

Il corso si propone di presentare i fondamenti teorici dei metodi di calcolo quantomeccanici e di meccanica molecolare e di fornire gli strumenti operativi di base per l'utilizzo di questi metodi nel calcolo delle proprietà molecolari. A integrazione delle lezioni teoriche verranno effettuate numerose esercitazioni al calcolatore e verrà tenuto un corso integrativo sui principi dell'informatica chimica.

*Equazione di Schrödinger e approssimazioni fondamentali.* Approssimazioni nell'operatore hamiltoniano: equazione di Schrödinger indipendente dal tempo; operatore Hamiltoniano molecolare non relativistico; approssimazione di Born-Oppenheimer. Approssimazioni nella funzione d'onda: approssimazione orbitale; il modello degli orbitali molecolari.

*Metodi MO ab initio.* Approssimazione di Hartree-Fock per sistemi closed-shell. Introduzione di un set di funzioni di base; equazioni di Roothaan. Schema del ciclo SCF. Limiti del metodo SCF. Energia di correlazione. Metodo dell'interazione di configurazioni e sue forme approssimate: CI troncato, MC-SCF. Approssimazione Coupled Cluster. Metodo perturbativo Moller-Plesset (MPn). Teoria del funzionale densità.

*Metodi MO semiempirici.* Approssimazioni fondamentali. Metodi NDDO, INDO e CNDO.

*Studio della superficie di energia potenziale (PES) conformazionale.* Definizione della PES e di analisi conformazionale. Caratterizzazione dei punti stazionari sulla PES. Metodi di ricerca dei punti stazionari.

*Funzioni densità elettronica e proprietà derivate.* Funzioni densità elettronica: forma, superficie e volumi molecolari; caratteristiche dei legami e densità differenza; partizionamento della carica elettronica sui singoli atomi. Proprietà elettroniche interne: il momento di dipolo molecolare; il potenziale elettrostatico molecolare. Proprietà elettroniche di risposta ad un campo elettrico: polarizzabilità molecolare; aspetti computazionali del calcolo delle derivate analitiche dell'energia: il metodo CPHF (Coupled Perturbed HF).

*Il metodo della Meccanica Molecolare.* Fondamenti teorici per la definizione del campo di forza di valenza. Potenziali di interazione intramolecolare e loro parametrizzazione. metodo Monte Carlo e metodo della Dinamica Molecolare.

*Principi di informatica chimica.* Algoritmi, compilatori, sistemi operativi e software di base, architettura degli elaboratori. Introduzione al calcolo parallelo: classificazione delle architetture parallele e principi di programmazione.

*Testi consigliati:*

D. Pitea, L. Bonati, U. Cosentino, E. Fraschini, G. Moro, G. Scalmani, A. Villa: *I metodi di calcolo quantomeccanici in chimica computazionale*. Dispensa

*Testi di consultazione:*

A Szabo, N.S.Ostlund: *Modern Quantum Chemistry*, editore Dover Publication Inc. (Mineola N.Y.) 1996

A.R. Leach: *Molecular Modelling: Principles and Applications*. Editore Longman, 1996

### 15.2 CHEMIOMETRIA (F11031)

PROF. ROBERTO TODESCHINI

Il corso si propone di presentare le metodologie e le tecniche chemiometriche rivolte al trattamento dell'informazione contenuta nei dati sperimentali e alla costruzione di modelli matematici predittivi. L'obiettivo del corso è quello di

fornire gli elementi fondamentali per trattare sistemi chimici complessi rappresentati in spazi multivariati. Nel corso verranno anche presentati alcuni degli sviluppi recenti in questo campo (reti neurali, algoritmi genetici, metodi di regressione nonlineare, ecc). All'inizio del corso verranno forniti i fondamenti di statistica e di algebra delle matrici al fine di facilitare la comprensione dei successivi contenuti del programma. Le lezioni teoriche saranno integrate da alcune esercitazioni al computer.

#### *Introduzione alla chemiometria*

Obiettivi, metodi e applicazioni. Nozioni fondamentali di algebra delle matrici. Le strutture dei dati multivariati. Parametri statistici elementari: indici di posizione e di dispersione; covarianza e correlazione. I concetti di distanza e di similarità.

#### *Strategie per la razionalizzazione di problemi complessi*

Metodi per l'esplorazione dei dati; analisi delle componenti principali. Metodi grafici univariati e multivariati. Eliminazione delle variabili ridondanti.

#### *Metodi di cluster analysis*

Il concetto di centroide e di centrotipo. Metodi gerarchici divisivi e agglomerativi. Metodi non gerarchici. Strategie per l'analisi di similarità.

#### *Metodi di classificazione*

Strategie di ricerca basate sulla classificazione e parametri di classificazione.

Il metodo knn. Le probabilità bayesiane e i metodi di analisi discriminante.

Metodi basati sulle componenti principali (SIMCA). Il controllo di qualità e i metodi di modellamento. Metodi di classificazione ad albero.

#### *Il concetto di bias e i metodi di validazione*

Stimatori statistici; bias e varianza. Modelli descrittivi e predittivi. Tecniche di validazione dei modelli (validazione incrociata, bootstrap, ecc.).

#### *Metodi di regressione*

Strategie di ricerca basate su modelli quantitativi e parametri di regressione. L'analisi di regressione multipla. I metodi di regressione biased: i metodi ridge, di selezione dei migliori sottomodelli, di analisi in componenti principali, metodo di regressione ai minimi quadrati parziali (PLS). Metodi diagnostici in regressione.

#### *Nuove strategie chemiometriche*

Gli algoritmi genetici. Nuovi metodi di regressione non-lineare PLS non-lineare; Alternating Conditional Expectations (ACE), Multivariate Adaptive Regression Splines (MARS). Le metodologie basate sulle reti neurali artificiali.

#### *Applicazioni a problemi chimici e ambientali*

Esempi di applicazioni chemiometriche a problemi chimici, farmacologici e ambientali. I descrittori molecolari: indici topologici molecolari; indici di informazione; indici WHIM. Le variabili sperimentali chimiche nelle problematiche ambientali. Introduzione alle relazioni quantitative attività-struttura (QSAR). Esercitazioni al calcolatore.

#### *Testi consigliati*

I.E. FRANK E TODESCHINI: The Data Analysis Handbook. Elsevier 1994.

R. TODESCHINI: Appunti del Corso di Chemiometria.

### **15.3 CHIMICA DEI COMPOSTI DI COORDINAZIONE (F11041)**

PROF. SECONDO MARTINENGO

Il corso si rivolge agli studenti interessati a seguire l'indirizzo inorganico.

### *Programma*

Introduzione e sviluppo storico. Numeri di coordinazione e relative geometrie. Classificazione dei leganti. Tipi di isomeria. Stabilità dei complessi: costanti di formazione parziali e globali. Effetto chelante e macrociclico. (10-11 ore)

Interazioni legante-metallo nei complessi con CO, isocianuri, cianuri, diazoto, NO e nei complessi con molecole organiche insature e con carbocicli aromatici. Leganti al fosforo: basicità, potere accettore, angolo conico. (circa 8 ore)

Legami multipli M-L: ossocomplessi, complessi ammidici, nitrenici, nitrurici, carbenici e carbinici. (2-3 ore)

Perossido, superossido e alcosso complessi; complessi con alogenuri a ponte. (2-3 ore)

Soluzioni di metalli alcalini in ammoniaca liquida. Complessi di metalli alcalini con eteri a corona e criptanti: alcaluri ed elettruri. (1 ora)

Teoria del campo cristallino applicata ai complessi ottaedrici, tetraedrici e quadrato-planari. Complessi ad alto e basso spin; spin crossover. Serie spettrochimica dei leganti. Distorsioni nei complessi; effetto Jahn-Teller. (4-5 ore)

Cenni della teoria degli orbitali molecolari applicata ai complessi ottaedrici. Cenni al modello della sovrapposizione angolare. Regola dei 18 elettroni e sue eccezioni; stati di ossidazione formale con esercizi. (5-6 ore)

Reattività dei complessi. Reazioni di sostituzione: meccanismi; complessi ottaedrici e quadrato-planari; effetto trans. Correlazioni tra labilità ed inerzia e configurazione elettronica del centro metallico. Ring slippage; sostituzioni in complessi a 17 e 19 elettroni; elettrocatalisi. (7-8 ore)

Reazioni di trasferimento elettronico con meccanismo a sfera interna ed esterna. (2-3 ore)

Non-rigidità stereochimica con esempi. (3 ore)

Complessi idrurici. Classificazione, metodi di sintesi, caratterizzazione e reattività. Interazioni agostiche. Complessi con idrogeno molecolare. (4 ore)

Metallo carbonili: classificazione, metodi di sintesi, caratterizzazione e reattività. (5-6 ore)

Ruolo dei complessi in catalisi omogenea; principali tipi di reazioni che si incontrano nei cicli catalitici. Esempi di cicli catalitici: water gas shift, idroformilazione e idrogenazione di alcheni, carbonilazione di alcoli. Eterogeneizzazione dei complessi. Catalisi bifasica. (3-4 ore)

#### *Testi consigliati:*

F.A. Cotton e G. Wilkinson, *Advanced Inorganic Chemistry*, quinta edizione inglese o terza edizione italiana.

### **15.4 CHIMICA ORGANICA (APPLICATA) (F11053)**

PROF. UMBERTO VALCAVI

Vengono studiate varie classi di composti importanti in chimica organica:

- amminoacidi e proteine
- carboidrati e polisaccaridi
- lipidi/prostaglandine/leukotrieni
- steroidi
- acidi nucleici.

#### *Aminoacidi e proteine*

- amminoacidi naturali e sintesi di amminoacidi otticamente attivi interessanti in campo industriale,
- proteine, struttura tridimensionale, isolamento, purificazione e sintesi (sia manuale che automatica mediante supporto solido con computer),
- alcune proteine di interesse biologico,
- recettori e alcuni farmaci recettoriali.

#### *Carboidrati e polisaccaridi*

- monosaccaridi più comuni e loro struttura,
- di e polisaccaridi più comuni
- sintesi di di e polisaccaridi
- polisaccaridi di interesse biologico.

#### *Lipidi/prostaglandine e leukotrieni*

- acidi grassi e trigliceridi
- fosfolipidi e glicolipidi
- prostaglandine prostaciline, trombassani
- leukotrieni e inibitori di leukotrieni, come anti-allergici.

#### *Steroidi*

- steroidi naturali e loro attività biologica
- stereochimica
- sintesi e produzioni industriali
- trasformazioni biologiche
- steroidi di interesse industriale e terapeutico
- Vitamine D
- Estrogeni
- Androgeni
- Progestativi
- Corticosteroidi
- Digitali cardioattivi.

#### *Acidi nucleici*

- nucleosidi e nucleotidi e loro sintesi
- cenni sui RNA e DNA
- sintesi di oligo e polinucleotidi
- principi elementari di ingegneria genetica
- principali prodotti industriali in commercio ottenuti con la ingegneria genetica.

#### *Alcune nozioni pratiche nel settore farmaceutico*

- metabolismo dei farmaci
- fasi e tempi per registrare un nuovo farmaco
- evoluzione del mercato farmaceutico italiano e mondiale
- chimica combinatoria.

#### *Testi consigliati:*

U.Valcavi, Dispense di Chimica Organica (Applicata).

## **15.5 ELETTROCHIMICA (F11054)**

PROF. TORQUATO MUSSINI

### *Generalità e definizioni*

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

### *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 di trasporto degli ioni nelle soluzioni elettrolitiche. Meccanismi e 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. Variazioni alla conducibilità con la temperatura e la pressione. Interazione soluto-solvente. Interazione con scambio di protoni. Interazioni elettrostatiche ione-dipolo. Numero di idratazione. Interazioni ione-ione. Interazioni elettrostatiche. Proprietà di trasporto in presenza di interazioni elettrostatiche. Potenziale chimico di ioni in soluzione. Stato standard per il soluto. Coefficienti di attività ionica media e loro dipendenza dalla concentrazione. Determinazione non elettrochimica dei coefficienti di attività ionica media.

### *Equilibri elettrochimici*

Convenzioni di segno. Misura 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 della F.E.M. standard ( $E'$ ) di pile e di coefficienti d'attività ionica media (+) di elettroliti. Potenziali di diffusione (potenziali interliquidi) 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.

### *Semielementi galvanici*

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

Determinazione di potenziali standard di 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 Poubaix).

### *Doppio strato elettrico*

Equilibri eterogenei in presenza di specie 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 elettronica. Equilibrio metallo-metallo. Potenziale di contatto. Equilibrio soluzione-soluzione Potenziale elettrochimico degli ioni. Equilibrio metallo soluzione. Valutazione dei potenziali assoluti.

### *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.

## 15.6 STRUTTURISTICA CHIMICA (F11060)

PROF. MIRELLA SANSONI

### a) *Simmetria cristallina*

Struttura di gruppo su un insieme di elementi omogenei per proprietà. Elementi di simmetria e operazioni di simmetria. Rappresentazione matriciale delle operazioni di simmetria puntuale. Gruppi di simmetria puntuali. Operazione di simmetria traslazionale: reticoli e spazi vettoriali. Compatibilità della simmetria puntuale con quella traslazionale: sistemi e classi cristalline, gruppi di simmetria spaziali o cristallografici. I cristalli come disposizione ordinata di oggetti atomici. Cella elementare e reticolo cristallino.

### b) *Diffrazione dei raggi X da parte di cristalli*

- 1) Produzione, assorbimento, diffusione dei raggi X: scattering Thomson e Compton, fluorescenza.
- 2) Trasformata di Fourier: sovrapposizione di onde, fase ed ampiezza risultante; spazio reale e reciproco; diffusione da parte di oggetti, ampiezza e fase della trasformata. Trasformata di un atomo e fattore diffondente 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; condizioni di Laue, equazione di Bragg; geometria della diffrazione da parte dei cristalli.
- 4) Intensità. Legge di Friedel, estinzioni sistematiche, fattori influenti sulle intensità diffratte: Lorentz-polarizzazione, temperatura e assorbimento.
- 5) Tecniche diffrattometriche per polveri e cristallo singolo; geometria delle camere e dei diffrattometri automatici relativi ai due metodi.
- 6) Il problema della fase: serie di Patterson e metodi diretti.
- 7) Metodi di affinamento dei parametri strutturali. Analisi dei risultati, accuratezza dei dati.

Il corso si articola in circa 60 ore di lezione e 10 di esercitazioni riguardanti:

- a) rappresentazione matriciale delle operazioni di simmetria e loro composizione, matrice metrica e suo utilizzo, costruzione del reticolo reciproco, trasformazioni di base.
- b) determinazione di cella reale e gruppo cristallografico utilizzando lastre di camera a precessione per cristallo singolo e consultando il I volume delle Tabelle Internazionali di Cristallografia.
- c) analisi di mappe Patterson per strutture con atomi pesanti e determinazione delle coordinate di posizione in cella.

### *Testi consigliati*

Giacovazzo et al., Fundamentals of Crystallography, Oxford Scienze Publications

J.P. Glusker, K.N. Trueblood, Crystal Structure Analysis. A Primer Oxford University 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

## 15.7 CHIMICA FISICA (COMPLEMENTI) (F11027)

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 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. Analiticità di una funzione complessa, teorema di Cauchy, formula integrale di Cauchy. Serie complesse: serie di Taylor e Laurent. Zeri e singolarità di una funzione. Teorema 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 o coseno. Forma complessa della serie di Fourier. Convergenza puntuale e convergenza in media, disuguaglianza di Bessel ed equazione di Parseval. Reazione di completezza di un insieme di funzioni. Serie di Fourier generalizzata. Serie di Fourier in tre dimensioni. La terna reciproca.

#### *Funzioni delta di Dirac*

Funzioni a cuspidi e funzioni delta di Dirac. Rappresentazioni delle funzioni delta, successioni delta e convergenza debole. Proprietà della delta. Sviluppo della 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. Applicazione 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 di 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 di 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, Cambridge, 1974

### **15.8 CHIMICA TEORICA (QUANTISTICA) (F11033)**

DOTT. MAURIZIO SIRONI

#### *I fondamenti matematici della meccanica quantistica*

Spazi di Hilbert ed operatori lineari: proprietà e loro applicazioni.  
Spazi degli stati e notazione di Dirac.

#### *I fondamenti della Meccanica Quantistica*

I postulati della Meccanica Quantistica. Teoria della misura in Meccanica quantistica. L'equazione di Schrodinger. I principi di Heisenberg. Pacchetto d'onda e sua evoluzione. Effetto tunneling. Stati legati in una buca di potenziale. L'oscillatore armonico: l'uso degli operatori di salita e di discesa.

#### *Particella in campo centrale*

teoria generale del momento angolare. Addizione di due momenti angolari. Fattorizzazione dell'equazione di Schrodinger. Risoluzione dell'equazione radiale.

#### *Tecniche di approssimazione*

Il principio variazionale. Il problema secolare ed il problema della separazione. Teoria delle perturbazioni statiche: correzioni al primo e secondo ordine. L'effetto Stark.

#### *Spin ed antisimmetria*

L'esperienza di Stern e Gerlach. Operatori di spin. Autofunzioni di spin: le autofunzioni genealogiche e di Rumer. Il diagramma di diramazione. Determinante di Slater. Calcolo degli elementi di matrice per l'operatore hamiltoniano.

#### *Interazione della luce con la materia*

teoria perturbativa dipendente dal tempo. L'Hamiltoniana di una particella interagente con il campo elettromagnetico. Emissione ed assorbimento.

#### *Testi consigliati:*

P.W. Atkins e R.S. Friedman, Molecular Quantum Mechanics, Oxford (1997).

T.N. Levine, Quantum Chemistry, 4th Ed. Prentice Hall International (1991).

### **15.9 CHIMICA BIOORGANICA (F11046)**

PROF. UMBERTO VALCAVI

Crediti totali: 6

Scopo del corso:

Il corso di "Chimica Biorganica" si propone di illustrare agli studenti che nelle produzioni chimiche, accanto a reagenti chimici, esistono anche gli enzimi, che sono sempre più utilizzati nei processi produttivi chimici industriali, perché sono più selettivi e stereoselettivi, sono poi enantioselettivi e meno inquinanti e spesso meno costosi.

Il corso intende anche illustrare i processi biotecnologici ( di ingegneria genetica), le applicazioni industriali e gli sviluppi previsti in questo campo.

#### 1) Uso di enzimi:

- crediti parziali = 3
- principali reazioni ottenibili con enzimi,
- vantaggi e svantaggi delle reazioni enzimatiche,
- enzimi supportati ( riciclabili) e uso di enzimi in solventi organici,
- coenzimi e loro rigenerazione,
- processi industriali che utilizzano enzimi ,
- enzimi artificiali ( Chemzymes).

#### 2) Biotecnologie con il DNA-ricombinante ( ingegneria genetica):

crediti parziali = 3

- breve cenno su DNA, RNA e codice genetico,
- biosintesi dei nucleotidi e sintesi pre-biotica ( formazione della vita sulla terra),
- sintesi chimiche degli oligonucleotidi, sintesi automatica assistita da computer,
- analisi e purificazione di polinucleotidi,
- tecniche del DNA ricombinante,
- impronte genetiche e Polymerase Chain Reaction ( per moltiplicare frammenti di DNA ),
- applicazioni industriali dell'ingegneria genetica alla produzione di farmaci ,
- applicazioni industriali dell'ingegneria genetica al campo agro-alimentare,
- animali transgenici per produrre farmaci,
- studi del genoma umano e nuovi sviluppi per la cura di malattie attualmente incurabili.

*Testi consigliati:*

- Umberto Valcavi " Dispense di Chimica Biorganica",

*Eventualmente da consultare:*

- R.K. Murray et al. " Harper's Biochemistry" 22th Ed. Prentice Hall Inc., New York,1990,
- L. Stryer, " Biochimica " 3° Ed. Zanichelli, 1989

**15.10 CHIMICA DELLE MACROMOLECOLE (F 12032)**  
PROF. PAOLO FERRUTI

Vedi programma nella sezione di Chimica Industriale

**CORSO DI LAUREA IN CHIMICA**  
**PROGRAMMI DEGLI INSEGNAMENTI**  
**DEL BIENNIO DI STUDI DI APPLICAZIONE**

## INSEGNAMENTI FONDAMENTALI DI INDIRIZZO

### 16A. CHIMICA INORGANICA (2° corso) (F11016)

PROF. ALESSANDRO PASINI

#### 1) *Complementi di Chimica degli Elementi di non transizione*

Stati di ossidazione. Numeri e geometrie di coordinazione, VSEPR e sue eccezioni. Acidità e basicità dei composti. Catenazione. Legami multipli M=M e M=E. Metallo alchili. Legami policentrici bieletronici.

#### 2) *Metalli di transizione e loro composti*

Stati di ossidazione e proprietà generali.

#### 3) *Il sistema metallo legante*

Tipologie e nomenclatura. Denticità e apiticità. Donazione e retrodonazione. Regola dei 18 elettroni e sue eccezioni. Analogie isolobali.

Aspetti termodinamici. Fattori entalpici ed entropici.

Stabilità pratica e meccanismi di decomposizione. Effetto della chelazione ed effetto macrociclo. Aspetti elettronici. Teorie degli orbitali molecolari e del campo cristallino. Magnetismo. Stabilizzazione degli stati di ossidazione e delle geometrie di coordinazione. Stabilizzazione di molecole o gruppi mediante coordinazione.

#### 4) *Molecole stereochimicamente non rigide*

Metodi di studio ed esempi.

#### 5) *Reattività del sistema metallo-legante*

Reazioni di somma ossidativa e loro inverso.

Reazioni di migrazione-inserzione e loro inverso.

Attivazione e reattività di leganti coordinati.

Esempi di cicli catalitici.

#### 7) *Aspetti biomedici della Chimica Inorganica*

NMR imaging. Cisplatino.

Il corso sarà inoltre affiancato da una quindicina di ore di esercitazioni e discussioni in aula sugli argomenti trattati.

### 16B. LABORATORIO DI CHIMICA INORGANICA (2° corso) (F11016)

PROF.SSA FRANCESCA PORTA

Questo corso di laboratorio è dedicato alla sintesi aerobica ed anaerobica di complessi inorganici e metallorganici e alla loro caratterizzazione spettroscopica e chimico-fisica. Le esperienze sono organizzate in modo da esemplificare trasformazioni stechiometriche e catalitiche di substrati organici mediante attivazione su centro metallico. L'analisi dei prodotti e degli intermedi, sia organici che metallorganici, sarà volta ad illustrare il meccanismo di reazione.

Le esercitazioni su banco singolo sono associate a lezioni teoriche vertenti sulle metodologie di sintesi caratteristiche della chimica inorganica e metallorganica.

#### *Testi consigliati*

D.F. Shriver, M.Y. Drezdson, *The manipulation of air-sensitive compounds*, Ed. Wiley Interscience.

J. Woollins, *Inorganic Experiments*, VCH.

### 17A. CHIMICA INORGANICA (3° corso) (F11017)

PROF. ANGELO SIRONI

Lo scopo primario del corso sarà quello di:

- i) mostrare l'importanza del concetto di struttura molecolare per la razionalizzazione della reattività e delle proprietà spettroscopiche;
- ii) descrivere i principali metodi (diffrattometrici e spettroscopici) attualmente in uso per la determinazione (anche solo parziale) della struttura molecolare nei diversi stati di aggregazione;
- iii) fornire gli strumenti necessari per la ricerca e l'utilizzazione delle informazioni strutturali presenti nella letteratura scientifica;
- iv) descrivere alcuni modelli teorici semiempirici utili per razionalizzazione della stereochemica dei composti organometallici e di coordinazione.

#### **Testi consigliati**

- E. A. V. Ebsworth, D. W. H. Rankin, S. Craddock, *Structural Methods in Inorganic Chemistry*, Blackwell Scientific Pub. (1991)
- T. A. Albright, J. K. Burdett, M.-H. Whangbo, *Orbital Interaction in Chemistry*, Wiley (1985).
- I. E. Fergusson, *Stereochemistry and bonding in Inorganic Chemistry*, Prentice Hall (1974).
- P. Comba and T. W. Hambley, *Molecular Modeling of Inorganic Compounds*, VCH (1995).

### **17B. LABORATORIO DI CHIMICA INORGANICA (3° corso) (F11017)**

PROF. ANGELO SIRONI

Lo scopo primario del corso sarà quello di:

- i) mostrare l'importanza del concetto di struttura molecolare per la razionalizzazione della reattività e delle proprietà spettroscopiche;
- ii) descrivere i principali metodi (diffrattometrici e spettroscopici) attualmente in uso per la determinazione (anche solo parziale) della struttura molecolare nei diversi stati di aggregazione;
- iii) fornire gli strumenti necessari per la ricerca e l'utilizzazione delle informazioni strutturali presenti nella letteratura scientifica;
- iv) descrivere alcuni modelli teorici semiempirici utili per razionalizzazione della stereochemica dei composti organometallici e di coordinazione.

#### *Testi consigliati*

- E. A. V. Ebsworth, D. W. H. Rankin, S. Craddock, *Structural Methods in Inorganic Chemistry*, Blackwell Scientific Pub. (1991)
- T. A. Albright, J. K. Burdett, M.-H. Whangbo, *Orbital Interaction in Chemistry*, Wiley (1985).
- I. E. Fergusson, *Stereochemistry and bonding in Inorganic Chemistry*, Prentice Hall (1974).
- P. Comba and T. W. Hambley, *Molecular Modeling of Inorganic Compounds*, VCH (1995).

### **18A. CHIMICA FISICA (3° corso) (F11018)**

PROF. MARIO RAIMONDI

#### *Introduzione a 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 modello 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 pressione 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 a 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 del 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.

Metodi approssimati per risolvere l'equazione di Boltzmann.

#### *Processi irreversibili e fluttuazioni*

Equazione di Langevin. Analisi dettagliata dei moti Browniani. Funzione di correlazione e termini dissipativi: Teorema di fluttuazione e dissipazione.

Derivazione dell'equazione di Fokker-Planck. Soluzione dell'equazione di Fokker-Planck.

### **18B. LABORATORIO DI CHIMICA FISICA (3° corso) (F11018)**

PROF. EMANUELE ORTOLEVA

*Argomenti:*

Approssimazione di Born-Oppenheimer.

Curve di potenziale, ottimizzazione di geometrie, barriere di rotazione e di inversione, stati di transizione.

Equazione di Hartree-Fock Roothaan.

Prestazioni dei basis sets più comuni.

Errore di correlazione e suoi effetti.

Analisi di popolazione e proprietà elettrostatiche.

Calcolo dei modi normali di vibrazione.

La coordinata intrinseca di reazione.

Funzione di ripartizione molecolare e grandezze termodinamiche.

Equazione di Eyring per la costante cinetica.

*Esercitazioni:*

Verranno svolte esercitazioni al computer volte ad apprendere l'utilizzo e le potenzialità di un programma di calcolo quantomeccanico (Es.: GAUSSIAN-92 per Windows). In particolare verranno affrontati i seguenti problemi:

- Ottimizzazione della geometria di una molecola con diversi basis sets.
- Individuazione dei possibili isomeri e valutazione della loro stabilità relativa.
- Stima dell'interazione tra i legami: reazioni isodesmiche.
- Calcolo delle frequenze vibrazionali e delle grandezze termodinamiche, analisi dei modi normali di vibrazione.
- Studio di una reazione: ottimizzazione delle geometrie di minimo, individuazione degli stati di transizione, calcolo delle coordinate intrinseche di reazione, valutazione delle barriere di reazione, calcolo delle costanti cinetiche.

**19A. CHIMICA FISICA (4° corso) (F11019)**

PROF. ERMANNO GIANINETTI

Struttura atomica di equilibrio dei solidi cristallini: simmetria traslazionale, reticolo cristallino diretto e reciproco, gruppi spaziali di simmetria, esempi di struttura di sostanze solide semplici.

Metodi sperimentali di studio delle proprietà strutturali dei solidi: diffrazione di raggi X, di elettroni e di neutroni su monocristalli e su polveri; spettroscopia di assorbimento di raggi X, EXAFS e struttura locale di fasi solide amorfe o liquide.

Energia interna dei solidi cristallini: componente statica e componente vibrazionale. Analisi delle vibrazioni atomiche nell'approssimazione quasi armonica; modi normali, relazioni di dispersione, fononi acustici e ottici. Proprietà termodinamico-statistiche dei solidi.

Stati elettronici e legame chimico nei solidi: teorema di Bloch, bande di energia, modello di Kronig-Penney, metodi quantistici approssimati per il calcolo della funzione d'onda nei cristalli (LCAO, onde piane).

I dielettrici. relazioni tra polarizzazione, campo macroscopico e campo microscopico. Campo di depolarizzazione. Polarizzabilità molecolare. Suscettività elettrica. Polarizzabilità elettronica, ionica e dipolare. Dipendenza della polarizzabilità elettrica dalla frequenza del campo elettromagnetico. Sostanze ferroelettriche. Transizioni di fase del primo e del secondo ordine. teoria di Landau.

**19B. LABORATORIO DI CHIMICA FISICA (4° corso) (F11019)**

PROF. CESARE OLIVA

Il corso prevede lo svolgimento di esperienze di laboratorio nel campo della chimica fisica dei solidi o della



spettroscopia E.S.R.. Le lezioni di laboratorio saranno precedute e integrate da lezioni in aula.

#### *Argomenti delle lezioni*

Richiami di struttura dei solidi. Richiami di termodinamica. I diagrammi di fase. Difetti nei solidi: analisi termodinamica. Impurezze. Ionizzazione di difetti. Proprietà ottiche dei difetti. Fenomeni di trasporto in conduttori ionici ed elettronici. Metodi sperimentali in chimica fisica dello stato solido.

#### *Esperienze di stato solido*

Si prevede lo svolgimento di un'unica esperienza articolata su 15 pomeriggi. Ogni gruppo (3-4 studenti) dovrà individuare, con il supporto del Docente e di un Ricercatore, una strategia di ricerca atta a risolvere uno specifico quesito sulle proprietà chimico-fisico di un materiale. Il gruppo dovrà pertanto occuparsi della preparazione, del trattamento e della caratterizzazione del materiale stesso. Le tecniche di caratterizzazione poste a disposizione degli studenti includono le spettroscopie FTIR UV-vis e ESR, i metodi diffrattometrici e le tecniche di misura di conducibilità elettrica. Le esercitazioni sperimentali saranno eventualmente affiancate da un lavoro di ricerca bibliografica che gli studenti svolgeranno presso la Biblioteca Chimica.

#### *Esperienze di spettroscopia E.S.R.*

Si prevede lo svolgimento di più esperienze articolate su 15 pomeriggi.

1. Studio E.S.R. delle impurezze di vanadile che drogano un monocristallo orientato di acetato di magnesio.
2. Ricostruzione con il computer del tensore magnetico del vanadile che droga il cristallo di acetato di magnesio.
3. Interpretazione con il computer di spettri H-ENDOR di vanadile e di acido sulfammico irraggiato con raggi (greco).

Gli studenti presenteranno come prova scritta d'esame una tesina comprensiva della attività sperimentale svolta, delle conoscenze acquisite attraverso la letteratura consultata e delle conclusioni ottenute dall'analisi dei dati sperimentali.

### **20A. CHIMICA ORGANICA (3° corso) (F11020)**

PROF. GIOVANNI RUSSO

#### *1. Legame chimico e struttura molecolare in Chimica Organica*

Teoria degli orbitali di valenza. Teoria degli orbitali molecolari. Orbitali molecolari di frontiera.

#### *2. Stereochimica organica*

Stereochimica statica: principi generali. Costituzione, configurazione, conformazione. Determinazione della struttura e della stereochimica. Metodi di indagine spettroscopici, fisici e chimici. Enantiomeri, diastereomeri. Elementi di simmetria.

Proprietà chirottiche.

Prostereoisomeria: gruppi e facce omotopici ed eterotopici.

Determinazione della configurazione relativa ed assoluta. Discriminazione di stereoisomeri. Racemi e loro proprietà.

Determinazione della purezza enantiomerica e diastereoisomerica. Separazione di stereoisomeri. Racemizzazione ed epimerizzazione. Chiralità in assenza di stereocentri.

Stereochimica dinamica. Effetti conformazionali, sterici e stereoelettronici sulla reattività. Sintesi stereoselettive.

Riconoscimento molecolare.

#### *3. Reattività delle molecole organiche*

Studio dei meccanismi di reazione. Dati termodinamici e cinetici. Effetti dei sostituenti e correlazioni di energia libera. Controllo cinetico e termodinamico. Isolamento di intermedi di reazione, uso degli isotopi, aspetti stereochimici, catalisi acida e basica, effetto dei solventi.

Sostituzioni nucleofile:  $S_N1$  e  $S_N2$ , carbocationi, nucleofilicità, effetti del solvente, gruppi uscenti, effetti sterici e dei sostituenti, partecipazione dei gruppi vicinali. Ioni carbonio classici e non classici. Trasposizioni dei carbocationi.

Reazioni di addizione. Reazioni di eliminazione  $E_1$ ,  $E_2$ ,  $E_1c_b$ . Meccanismi relativi. Effetti di orientamento, effetti sterici e aspetti stereochimici.

Carbanioni e altri nucleofili. Enoli ed enammine. Reazioni dei composti carbonilici: reazioni di addizione-eliminazione, idrolisi e amminolisi degli esteri, acilazione all'ossigeno e all'azoto.

Reazioni concertate e loro meccanismo: elettrocicliche, sigmatropiche, cicloaddizioni, cicloaddizioni 1,3-dipolari, chelotropiche.

Radicali. Generazione e caratterizzazione. Radicali stabili. Proprietà strutturali e stereochimiche degli intermedi radicalici. Specie radicaliche cariche. Reazioni a catena. Effetti stereoelettronici, polari e sterici. Reazioni intra- e intermolecolari. Reazioni di sostituzione, di addizione, di trasposizione e di frammentazione. Reazioni di trasferimento elettronico.

Reazioni ioniche e radicaliche di polimerizzazione e di policondensazione.

## **20B. LABORATORIO DI CHIMICA ORGANICA (3° corso) (F11020)**

PROF. PAOLA DEL BUTTERO

Il corso si articola in 15-20 lezioni teoriche e almeno 60 h di lavoro sperimentale a banco singolo.

Il corso si prefigge di stimolare nello studente, che già dovrebbe aver acquisito con i Corsi precedenti oltre ad una solida conoscenza teorica anche una buona abilità manuale, la curiosità per le problematiche connesse con il lavoro di sintesi e di fornirgli, per quanto possibile, una metodologia per risolverle.

A tale scopo nel corso delle lezioni lo studente imparerà come impostare una strategia di sintesi in più step di prodotti ad interesse applicativo, partendo da un'analisi critica dei dati di letteratura, e cercando di adattarli al problema contingente con una certa libertà nelle scelte, ma senza trascurare problemi di fattibilità (costo dei reagenti, pericolosità delle operazioni ecc.) e dell'impatto ambientale.

Nel corso delle ore di lavoro sperimentale lo studente dovrà realizzare le sintesi progettate e avrà così modo di dar prova non solo delle capacità di gestire una reazione condotta in scala ridotta, ma anche di una certa elasticità mentale capace di adattarsi di volta in volta ai problemi che possono presentarsi, non ultimo anche quello di un insuccesso.

Dato che lo scopo ultimo è quello di ottenere un prodotto mirato, lo studente dovrà anche acquisire una certa capacità nell'utilizzo delle più comuni tecniche di purificazione ed analitiche. Inoltre allo scopo di meglio far comprendere e proiettare lo studente nella realtà che dovrà affrontare nel mondo del lavoro, è previsto anche l'intervento di un esperto di un laboratorio di ricerca e sviluppo dell'industria che aiuterà gli studenti nelle scelte da operare sia a livello di progettazione che di esecuzione della sintesi.

## **21A. CHIMICA ORGANICA 4° corso (F11021)**

PROF. CARLO SCOLASTICO

### *Alchilazione del carbonio nucleofilo*

Generazione di carbanioni per deprotonazione, regio- e stereo-selettività nella formazione di enolati. Generazione alchilazione di dianioni. Alchilazione di anioni ambidentati. Alchilazione di aldeidi, esteri, ammidi e nitrili. Analoghi azotati di enoli ed enolati: enammine e anioni di immine. Addizione coniugata di carboni nucleofili.

### *Reazioni di carboni nucleofili con gruppi carbonilici*

Condensazione aldolica, aldoliche miste con aldeidi aromatiche, regio- e stereo-chimica di condensazioni aldoliche miste coinvolgenti aldeidi alifatiche e chetoni, aldoliche intramolecolari, anellazione di Robinson. Condensazioni di immine e ioni imminio. Reazione di Mannich. Acilazione di carbanioni.

La reazione di Wittig e Horner-Emkoms. Reazione di composti carbonilici con alfa-trimetilsilil carbanioni. Iliidi dello zolfo.

### *Gruppi protettivi*

Gruppi protettivi dell'ossidrile, delle ammine, del carbonile e del carbossile.

### *Interconversioni di gruppi funzionali per sostituzione nucleofila*

Trasformazione di alcoli in agenti alchilanti (esteri solfonici, alogenuri). Introduzione di gruppi funzionali per sostituzione nucleofila al carbonio saturo (nitrili, azidi, alchilazione di ammine e ammidi, nucleofili ossigenati, solforati e del fosforo). Scissione nucleofila dei legami carbonio-ossigeno in eteri ed esteri. Reagenti per l'acilazione: preparazione

di esteri e di ammidi.

*Addizioni elettrofile a legami multipli carbonio-carbonio*

Addizioni elettrofile a legami multipli carbonio-carbonio (addizioni di acidi allogenidrici, idratazione, ossimercurazione, addizione di alogeni, reagenti elettrofili dello zolfo e del selenio, sostituzioni elettrofile in alfa a composti carbonilici, addizioni ad alleni e ad alchini). Addizione a doppi legami di organoborani (idrobrazione, reazione degli organoborani, idrobrazione enantioselettiva, idrobrazione di alchini).

*Riduzione di gruppi funzionali*

Idrogenazione catalitica, trasferimento di idrogeni ad altri reagenti. Idruri (riduzione di composti carbonilici e altri gruppi funzionali). Riduzione con metalli in soluzione (addizione di idrogeno, eliminazione riduttiva di gruppi funzionali, alchilazione riducente).

Deossigenazione riduttiva di composti carbonilici.

*Cicloaddizioni, riassamenti, eliminazioni termiche*

Reazioni di cicloaddizione (la reazione di Diels-Alder inter- e intramolecolare). Reazioni di cicloaddizione dipolare. Cicloaddizione (2+2) e altre reazioni che conducono a ciclobutani. Reazioni fotochimiche di cicloaddizione. Riassamenti sigmatropici (3,3) (riassamenti di Cope e di Claisen). Riassamenti sigmatropici (2,3) Ene-reaction). Reazioni di eliminazione termica unimolecolare eliminazione chelotropica, decomposizione di azotocomposti ciclici, beta-eliminazioni coinvolgenti stati di transizione ciclici).

*Composti organometallici dei metalli del 1° e 2° gruppo*

Preparazione, proprietà e reazioni di organolitio, organomagnesio, organozinco, organocadmio, organomercurio, organocerio.

*Reazioni coinvolgenti metalli di transizione*

Preparazione e reazioni coinvolgenti intermedi di organorame, organopalladio, organonichel, organorodio, organoferro e organocobalto.

Reazioni di formazione del legame carbonio-carbonio. Reazioni coinvolgenti composti del boro, del silicio e dello stagno.

Reazioni coinvolgenti intermedi molto reattivi poveri di elettroni. Reazioni di: carbocationi, carbeni, nitreni, radicali liberi.

*Ossidazioni*

Ossidazioni di alcoli ad aldeidi, a chetoni e ad acidi carbossilici. Addizione di ossigeno a doppi legami carbonio-carbonio. Scissione di doppi legami carbonio-carbonio. Scissione ossidativa di glicoli. Decarbossilazione ossidativa. Ossidazioni di chetoni ed aldeidi. Ossidazione allilica. Ossidazioni di carboni nonfunzionalizzati.

## **21B. LABORATORIO DI CHIMICA ORGANICA (4° corso) (F11021)**

Il corso si prefigge lo scopo di far acquisire allo studente una buona conoscenza sperimentale legata all'impiego di reagenti per i quali devono essere usate particolari precauzioni nella manipolazione (ad es. composti organometallici, diborani, ilidi, ecc.). Verranno sperimentate in microscala alcune delle reazioni illustrate nel corso teorico. Le sintesi saranno articolate in una cascata di tre o quattro reazioni, alcune delle quali necessitano di particolari condizioni sperimentali.

## INSEGNAMENTI OPZIONALI DI INDIRIZZO

### 22. CHIMICA COMPUTAZIONALE (F11022)

(vedi programma 15.1)

### 23. METODI FISICI IN CHIMICA ORGANICA (F11023)

PROF. BRUNO DANIELI

*I Parte: La Risonanza Magnetica Nucleare*

*Influenza della simmetria molecolare e della chiralità sugli spettri RMN*

Isocronia. Diastereotopia. Omotopia e enantiotopia. Analisi di sistemi di spin degenerati attraverso bande satelliti di  $^{13}\text{C}$  e sostituzione H-D.

*Analisi degli spettri RMN ad alta risoluzione*

Calcolo dei sistemi di spin di ordine superiore AB,  $A^2B$ , ABX, AA'XX'. Spettri con sistemi di spin ingannevolmente semplici. Accoppiamenti virtuali. Simulazione degli splitting patterns mediante programma di calcolo implementato su PC.

*Tecniche ausiliarie nella RMN*

Magneti superconduttori. Esperimenti di doppia risonanza. Disaccoppiamento di spin. Disaccoppiamento selettivo e spin-tickling. Doppia risonanza eteronucleare. Disaccoppiamento a banda larga.

*Tecniche pulsate in RMN*

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. Gated decoupling. Meccanismi di rilassamento. Misura dei tempi di rilassamento  $T_1$  e  $T_2$ : Inversion recovery e spin echo. Significato strutturale dei tempi di rilassamento. Misura quantitative negli spettri  $^{13}\text{C}$ .

*Tecniche RMN multipulsante mono- e bidimensionali*

L'esperimento di spin echo eteronucleare ed omonucleare. Esperimento spin echo modulato. Innalzamento del segnale per trasferimento di polarizzazione (esperimenti SPI e INEPT). Esperimenti DEPT. Spettroscopia bidimensionale correlata eteronucleare (H,C-COSY) ed omonucleare (H,H-COSY). L'effetto nucleare Overhauser e l'esperimento NOESY.

*Teoria del chemical shift*

- Protone. Contributo del diamagnetismo locale e della densità elettronica degli atomi vicini. Influenza dei momenti magnetici indotti (anisotropia). Corrente di anello in sistemi ciclici coniugati ed elettroni pi. Effetto del campo elettrico. Legame di idrogeno. Effetto del solvente.
- Carbonio. Regole di additività. Effetto gamma. Tecniche per l'assegnazione dei segnali.

*Costanti di accoppiamento spin-spin*

La costante diretta, geminale e vicinale: variazione dei valori in funzione dei sostituenti e della relazione spaziale in sistemi aciclici e ciclici. Costanti di long-range H-H e C-H in sistemi saturi e insaturi.

*Interpretazione degli spettri RMN ad alta risoluzione come esemplificazione dei concetti esposti nel corso delle lezioni teoriche e come metodo di verifica dell'apprendimento.*

*Testi consigliati:*

H. Friebolin, Basic One-and Two-Dimensional NMR Spectroscopy, VCM

B. Danieli e G. Lesma, Equivalenza magnetica e classificazione dei sistemi di spin, Dispensa CUSL, 1992

G. Lesma e B. Danieli, Guida alla interpretazione degli spettri di RMN: esercizi e problemi. Dispensa CUSL, 1992

*II Parte: La Spettrometria di Massa*

*Aspetti strumentali del MS. Descrizione di uno strumento EI/E-B*

*Nuovi aspetti strumentali della MS*

Sorgenti FAB e FIB, thermospray, electrospray. Analizzatori a quadrupolo, MALDI-TOF. Accoppiamento GC/MS e LC/MS. Determinazione della composizione di uno ione mediante peak-matching ed HR-MS. L'uso del calcolatore in MS: problemi di acquisizione, calibrazione, elaborazione degli spettri, ricerca su banche dati.

*Maggiori informazioni strutturali da ciascun ione: MS-MS*

Ioni metastabili a decomposizione spontanea ed attivata. Esperimenti tandem-MS: B/E, B<sup>2</sup>/E, neutral loss, MIKE (per strumenti a geometria inversa). Tripli quadrupoli. Strumenti a configurazione ibrida. Collisioni ad alte e basse energie.

*Il processo di ionizzazione delle molecole*

Ionizzazione adiabatica e verticale (principio di Frank-Condon). Determinazione dei potenziali di ionizzazione. La distribuzione dell'energia interna dello ione molecolare. Effetto dei sostituenti sul potenziale di ionizzazione.

*Teoria del Quasi Equilibrio (QET)*

Introduzione. Assunzioni fondamentali. L'espressione della costante di velocità. Teoria QET modificata. Tests sperimentali della QET.

*Applicazioni della QET alla Spettrometria di Massa*

Curve di logk contro E. Energia interna e vita media di uno ione in reazioni competitive di riarrangiamento e di semplice frammentazione. Distribuzione dell'energia interna tra i frammenti. Effetti cinetici. Effetti dei sostituenti nelle reazioni di frammentazione.

*Testi consigliati:*

J.R. Chapman, Practical Organic Mass Spectrometry, Wiley, London

M.E. Rose and R.A.W. Johnstone, Mass Spectroscopy for Chemists and Biochemists, Cambridge University Press, Cambridge

**24. CHIMICA BIOINORGANICA (F11024) (Mutuato da Farmacia)**

**25. CHIMICA FISICA AMBIENTALE (F11025)**

**NON ATTIVATO**

**26. CHIMICA FISICA DEI MATERIALI (F12028) (Mutuato da Chimica Industriale)**

**27. CHIMICA FISICA (COMPLEMENTI) (F11027)**

Vedi programma n. 15.7

**28. CHIMICA INORGANICA (APPLICAZIONI) (F11028)**

**DOTT. STEFANO TOLLARI**

Il corso tratta alcuni aspetti della chimica organometallica degli elementi del main group illustrando le proprietà chimiche, strutturali e spettroscopiche e la reattività chimica, stechiometrica e catalitica dei composti che presentano legami metallo-carbonio. Nella seconda parte vengono affrontate le applicazioni alla sintesi organica di composti organometallici di alcuni elementi di transizione aventi come leganti olefine, diolefine, alchini, ciclopentadieni, areni e carbeni. Il corso è organizzato come facente parte di una triade di insegnamenti, che insieme dovrebbero fornire una più ampia visione della chimica organometallica (Chimica Inorganica-Applicazioni; Chimica Inorganica-Reattività dei Composti Organometallici; Chimica Metallorganica).

*Organometallici degli elementi del main group*

- 1) Introduzione. Classificazione dei composti organometallici. Energia, polarità e reattività dei legami M-C; stabilità e reattività dei composti organometallici del main group.
- 2) Metodi generali di sintesi.
- 3) Composti organometallici dei metalli alcalini. Struttura, legami e reattività.
- 4) Organometallici degli alcalino terrosi. Sintesi, reattività e strutture dei composti di organomagnesio e loro applicazione alla sintesi. Organometallici di berillio, calcio, stronzio e bario.
- 5) Composti organometallici di zinco, cadmio e mercurio.
- 6) Sintesi, struttura e reattività degli organocomposti di boro e alluminio. Cenni sugli organogallio, indio e tallio.
- 7) Composti metallo-carbonio del gruppo del silicio, germanio, stagno e piombo. Strutture, reattività del legame M-C ed applicazioni alla sintesi organica.
- 8) Cenni agli organocomposti di arsenico, antimonio e bismuto.
- 9) Composti organometallici di rame.

*Organometallici dei metalli di transizione*

- 10) Complessi di metalli di transizione con olefine e dieni; aspetti strutturali e reattività.
- 11) Complessi metallo-ciclopentadienilici. Complessi a sandwich, bent e monociclopentadienilici. Complessi arenici: strutture, preparazioni e reattività.
- 12) Complessi pigriceo allilici: preparazioni, strutture e reattività. Reattività degli allilnichel cloruro e allilpalladio cloruro.
- 13) Complessi carbenici tipo "Fischer" e tipo "Schrock": preparazioni, strutture, proprietà e reattività.

*Testi consigliati*

- a) Ch. Elschendroich, A Salzer: "Organometallics, a concise introduction"
- b) J.P. Colmann, L.S. Hegedus, J.R. Norton, R.G. Finke: "Principle and applications of organotransitions metal chemistry"

**29. CHIMICA INORGANICA (COMPLEMENTI) (F11029)**

PROF. LUIGI GARLASCHELLI

Il corso prenderà in esame uno degli aspetti della chimica organometallica che in questi ultimi anni ha avuto un grande sviluppo cioè la scoperta e l'evoluzione della chimica organometallica dei cluster molecolari. Il corso dovrebbe essere di particolare interesse per tutti gli studenti dell'indirizzo di chimica inorganica. Nel corso verranno discussi cluster molecolari carbonilici, cluster molecolari contenente metalli di transizione e zolfo (cubani), cluster dei metalli di transizione contenente alogeni e fosfine terziarie e cluster nudi.

*Per le diverse categorie di cluster verranno trattati i seguenti argomenti:*

- a) aspetti strutturali e di legame;
- b) sistematica di sintesi;
- c) reazioni di sostituzione dei leganti;
- d) riarrangiamento del poliedro dei metalli;
- e) reazioni di frammentazioni;
- f) cluster come catalizzatori o precursori catalitici per reazioni di catalisi in fase omogenea. Parte del corso verrà dedicato ad una ricerca bibliografica su un argomento di interesse per lo studente. Parte del materiale didattico verrà fornito dal docente.

*Libri consigliati*

The Chemistry of Metal Cluster Complexes. D.F. Shriver, H.D. Kaesz, R.D. Adams. VCH.  
Introduction to Cluster Chemistry. D.M.P. Mingos, D.J. Wales. Prentice Hall.  
Inorganometallic Chemistry. T.P. Fehlner, Plenum.  
Principles of Descriptive Inorganic Chemistry. G. Wulfsberg; Brooks Cole.

### **30. CHIMICA INORGANICA (CRISTALLOCHIMICA) (F11030)**

PROF.SSA MIRELLA SANSONI

Gli argomenti trattati in questo corso sono un approfondimento di argomenti accennati nel corso di Strutturistica Chimica, di cui si consiglia peraltro la precedenza.

Si intende portare lo studente a conoscenza di alcuni metodi che portano alla risoluzione strutturale, partendo da dati di diffrazione di raggi X sia da polveri che da cristallo singolo.

Diffrazione a polveri.

- a) Strumentazione: metodi a camera (Debye-Scherrer, Guinier e Gandolfi) e diffrattometri (Seemann-Bohlin e Bragg-Brentano). Aberrazioni sistematiche ed effetto dei parametri strumentali; principali fonti di errori che si ripercuotono sull'accuratezza delle misure di intensità, posizione angolare delle linee di diffrazione e allargamento delle linee.
- b) Analisi quantitativa mediante diffrazione di raggi X da polveri. Metodo dello Standard Interno (SI) e metodo del Rapporto delle Intensità di Riferimento (RIR).
- c) Fitting del profilo: "pulizia" dei dati raccolti ed eliminazione del rumore di fondo. Estrazione di tutte le informazioni contenute in un picco mediante metodi di convoluzione.
- d) Metodo di affinamento Rietveld e suoi vantaggi. Esempi di affinamento e di risoluzione col metodo Rietveld.

Metodi diretti in cristallografia.

- a) Metodi diretti e indiretti; metodi algebrici. Fattori di struttura unitari e fattori di struttura normalizzati.
- b) Relazioni di disequaglianza. Le disequaglianze di Harker e Kasper e loro applicazione. Disequaglianze per strutture con centro di simmetria. Invarianti di struttura. Disequaglianze per altri elementi di simmetria. Limitazioni. Relazioni tra le disequaglianze di Harker e Kasper e quelle determinanti.
- c) Relazioni di segno. Equazione di Sayre. Altre relazioni di segno per P1. Relazioni di segno in unione con le disequaglianze. Invarianti e seminvarianti di struttura. Applicazione delle relazioni di segno per la determinazione di strutture.
- d) Metodi probabilistici. I primi approcci di Wilson e di Phillips e Rogers. La monografia di Hauptman e Karle per strutture centrosimmetriche. L'addizione simbolica: strutture centrosimmetriche e non centrosimmetriche.
- e) Criteri per il riconoscimento della soluzione vera.

*Testi consigliati:*

J.I. Langford, D. Louer, Powder Diffraction, *Rep. Prog. Phys.* 59 (1996) 131-234.

D.L. Bisch, J.E. Post, Modern Powder Diffraction, *Reviews in Mineralogy*, vol. 20 (1989), Mineralogy Society of America, Washington.

M.M. Woolfson, Direct Methods in Crystallography, Oxford.

C. Giacovazzo, Direct Methods in Crystallography, Academic Press.

### **31. CHEMIOMETRIA (F11031)**

(vedi programma 15.2)

### **32. CHIMICA INORGANICA (REATTIVITÀ DEI COMPOSTI ORGANO-METALLICI) (F11032)**

PROF. FRANCESCA PORTA

Il corso presenta la sintesi e la reattività dei più rappresentativi complessi dei metalli di transizione. In particolare verrà presentata la reattività chimica, stechiometrica e catalitica, di complessi aventi legami Metallo-H, -N, -O, -S.

- 1) Sintesi, proprietà chimiche e strutturali di complessi idrurici e del diidrogeno. Reattività di idruro complessi. Idrogenazioni catalitiche omogenee.
- 2) Sintesi, proprietà chimiche e strutturali di complessi di metalli di transizione con il diossido di carbonio; reazioni di co-oligomerizzazione e carbosilazione.
- 3) Reattività dell'ossigeno di tripletto e di singoletto. Reagente di Fenton. Sintesi, proprietà chimiche e reattività di complessi cobalto-diossigeno e di complessi pofirinici di Fe(III) e Mn(III). Reazioni catalitiche di idrossilazione e di epossidazione. Sintesi e reattività di complessi perossidici e di peracidi inorganici nelle reazioni stechiometriche e catalitiche di ossidazione. Sistemi catalitici contenenti idroperossidi organici e complessi metallici; loro reazioni di epossidazione regio, stereo ed enantioselettive; epossidazione di Sharpless.
- 4) Proprietà chimiche e spettroscopiche di complessi di metalli di transizione aventi leganti azotati. Sintesi di complessi del diazoto e loro protonazione e riduzione. Sintesi e reattività di complessi nitrosilici, di complessi metallici di C-nitroso e nitro derivati organici. Complessi a legami multipli metallo-azoto: nitruro, nitreni, azido, isocianato, tetraazadieni, immino e amido complessi. Applicazioni in catalisi omogenea.
- 5) Sintesi, proprietà chimiche, spettroscopiche e reattività di complessi aventi come leganti solfuri, tioli, ossidi dello zolfo, ditiocarbammati, solfoni e solfossidi.

*Testi consigliati:*

-F.A.Cotton, G.Wilkinson, *Advances Inorganic Chemistry*, Wiley, New York.

-J.P.Collman, L.S.Hegedus, J.R.Norton, R.G.Finke, *Principles and Applications of Organo-Transition Metal Chemistry*, University Science Books (1987)

-R.A.Sheldon, J.Kochi, Eds., *Metal Catalysed Oxidations of Organic Compounds*, Academic Press, New York (1981).

### **33. CHIMICA TEORICA (QUANTISTICA) (F11033)**

(Vedi programma 15.8)

### **34. MECCANISMI DI REAZIONE IN CHIMICA INORGANICA (F11034)**

*Parte prima*

*Concetti cinetici di base*

Velocità di reazione, ordine di reazione, equazioni cinetiche, esempi di reazioni con ordine zero, uno, due, frazionari, negativi, reazioni reversibili, multifasiche, parallele, effetto di acidi e basi.

*Parametri di attivazione*

G#, H#, S#, V#, equazione di Arrhenius e di Eyring, rate determining step, Linear Free Energy Relationships, effetto di temperatura, pressione, forza ionica.

*Metodi di monitoraggio delle velocità di reazione*



UV-visibile, ir, NMR, conduttimetria, metodi batch, polarimetria.

*Metodi per lo studio di reazioni veloci*

Stop flow, metodi di rilassamento, fotolisi e radiolisi, ricerca degli intermedi, marcatura isotopica.

Parte seconda

*Sostituzione nei complessi quadrato-planari*

Effetto del solvente, dei leganti entranti, uscenti, in cis, in trans, del metallo.

*Sostituzione nei complessi ottaedrici*

Complessi inerti e labili, meccanismo associativo, dissociativo, di interscambio, della base coniugata, Crystal Field Activation Energy.

*Reazioni dei complessi organometallici*

Sostituzioni nei metallo-carbonili, sostituzioni di fosfine, sostituzioni in complessi polimetallici, addizioni ossidative ed eliminazioni riduttive (meccanismo concertato, ionico, nucleofilo, radicalico), cicli di catalisi omogenea (idrogenazione, idroformilazione, processo Wacker, carbonilazione del metanolo, metatesi di olefine).

*Isomerie e trasformazioni stereochimiche*

Isomeria di spin, conformazionale, configurazionale, geometrica, ottica in complessi tetra-, penta-, esa-coordinati, flussionalità di carbonili, ciclopentadieni, olefine.

*Reazioni redox*

Per sfera esterna, equazione di Marcus, per sfera interna, effetto del legante a ponte, reazioni intermolecolari, Metallo-Metallo e Metallo-Legante.

*Reazioni dei leganti*

Il metallo come punto di raccolta dei leganti, effetto templato, addizioni nucleofile, acidità dei leganti coordinati, tensioni steriche.

*Testi*

R.G. Wilkins; Kinetics and Mechanisms of Reactions of Transition Metal Complexes, VCH, New York, 1991

J.D. Atwood; Inorganic and Organometallic Reaction Mechanisms, Brooks/Cole, Monterey, California 1985

F. Basolo, R.G. Pearson; Mechanism of Inorganic Reactions, Wiley Interscience NY, 1967

K.J. Laidler, Chemical Kinetics, Harper Collins, New York, 1987.

**35. MINERALOGIA (F11035)**

**NON ATTIVATO**

**36. STEREOCHIMICA (INORGANICA) (F11036)**

**NON ATTIVATO**

**37. SINTESI E TECNICHE SPECIALI ORGANICHE (F11037)**

PROF. CARLO SCOLASTICO

*Protezione di gruppi funzionali:* (doppio legame, triplo legame, OH, NH<sub>2</sub>, CO e CO<sub>2</sub>H). Sintoni e gruppi mascheranti una funzionalizzazione.

*Reazioni di riduzione:* (idrogenazione catalitica, con diimide, reazioni con idruri del III e IV gruppo, idroborazioni, riduzioni con metalli in soluzione, deossigenazione riduttiva di gruppi carbonilici).

*Reazioni di ossidazione.* Ossidazione di alcoli ad aldeidi, a chetoni, ad acidi carbossilici con ossidanti di metalli di transizione e con altri ossidanti.

Addizione di ossigeno a doppi legami carbonio-carbonio: ossidanti di metalli di transizione, epossidi da alcheni con

peracidi, trasformazioni degli epossidi, reazioni degli alcheni con ossigeno singoletto.  
Scissione dei doppi legami: con ossidanti di metalli di transizione, per ozonolisi.  
Scissione ossidativa selettiva: glicoli e decarbossilazione ossidativa.  
Ossidazione di chetoni ed aldeidi: con ossidanti di metalli di transizione, con peracidi, con ossigeno, con altre ossidazioni.  
Ossidazione allilica.  
Ossidazione di carboni non funzionalizzati.

*Alchilazione di carboni nucleofili: enolati, enammine.*

*Reazione di carboni nucleofili con composti carbonilici (aldolica, anellazione di Robinson, Mannich, Wittig, ilidi dello zolfo, acilazione di carbanioni).*

*Composti 1,2/1,3/1,4/1,5/1,6 difunzionalizzati.*

*Analisi retrosintetica e strategia di sintesi.*

### **38. CHIMICA FISICA DEI SISTEMI DISPERSI E DELLE INTERFASI (F11038)** PROF.SSA SILVIA ARDIZZONE

*Termodinamica di sistemi contenenti una interfase.* Descrizioni convenzionali della regione interfase e grandezze termodinamiche relative. Adsorbimento. Equazione di adsorbimento di Gibbs. Isoterme di adsorbimento ed equazioni di stato bidimensionali di monostrati ideali e reali.

*Elettrificazione interfase.* Origine della elettrificazione e componenti della differenza di potenziale interfase. Potenziali di superficie e Volta: misure al contatto liquido-gas. Componenti ioniche del doppio strato; relazioni tra parametri elettrici e chimici: modelli di Gouy-Chapman, Stern-Grahame e molecolari. Componenti dell'energia libera di adsorbimento di specie elettrificate.

*Interfasi solido-gas.* Caratterizzazioni di superfici solide. Spettroscopie in UHV. Tensione superficiale ed energia libera di solidi. Fisisorbimento: tipi di isoterme. Equazioni BET. Adsorbimento su solidi porosi. Equazioni di Kelvin. Termodinamica dell'adsorbimento solido/gas.

*Interfasi fluide.* Equazioni di Young-Laplace e Kelvin. Misure di tensione superficiale e angolo di contatto. Energie di coesione ed adesione. Film fluidi di spandimento e adsorbimento. Sistemi colloidali liofilici e liofobici di natura fluida (soluzioni micellari, emulsioni, microemulsioni, schiume).

*Interfasi solido-liquido.* Tensione superficiale critica e bagnabilità di superfici solide. Adsorbimento da miscele binarie di non elettroliti e da soluzioni elettrolitiche. Elettrificazione di interfasi metallo-soluzione e reversibili: accessibilità dei parametri elettrici/chimici e modelli classici e "ad hoc".

*Sistemi colloidali.* Classificazione e stabilità termodinamica. Preparazione di sistemi ad elevata suddivisione. Proprietà ottiche e reologiche. Proprietà elettriche e metodi sperimentali per la determinazione dei parametri relativi alle diverse regioni del doppio strato elettrico.

*Stabilità di sospensioni liofobe.* Tipi di interazioni tra particelle. Teoria DLVO. Aspetti cinetici.

#### *Testi consigliati*

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

A. W. Adamson, Physical Chemistry of Surfaces, 5th Ed., John Wiley & Sons, 1988.

J. Lyklema, Fundamentals of Interface and Colloid Science, Academic Press, 1991.

### **39. CHIMICA DEI COMPOSTI DI COORDINAZIONE (F11039)**

(vedi programma 15.3)

### **40. CHIMICA FISICA DELLO STATO SOLIDO E DELLE SUPERFICI (F11040)**

PROF. SERGIO PIZZINI

#### *Parte I. Condizioni di stabilità dei solidi*

Fasi, condizioni di equilibrio tra fasi solide a due componenti.

#### *Parte II. Difetti di punto nei solidi*

Solidi ideali e solidi reali. Difetti di equilibrio e di non equilibrio. Concentrazione dei difetti di punto nei solidi ionici: trattazione termodinamica-statistica.

Impurezze nei solidi ionici: effetto sulla concentrazione dei difetti di punto.

Statistica di Fermi-Dirac applicata ai difetti di punto carichi.

Interazione tra difetti di punto nei solidi ionici: complessi tra difetti di punto e impurezze.

Energia di formazione dei difetti di punto: modello elettrostatico.

Creazione di difetti mediante irraggiamento con particelle e fotoni: danni da radiazione.

Difetti di punto nei solidi covalenti. Natura puntuale ed estesa delle vacanze ed interstiziali.

Impurezze nei solidi covalenti: impurezze donatrici ed accettrici, cariche mobili nei semiconduttori, livello di Fermi intrinseco ed estrinseco.

Aggregazione dei difetti di punto e delle impurezze nei solidi covalenti.

#### *Parte III. Proprietà di trasporto*

Modello dei salti termicamente attivati, coefficiente di diffusione.

Derivazione di leggi fenomenologiche (legge di Ohm, legge di Fick).

Conducibilità dei solidi ionici, effetto delle impurezze.

Conducibilità anomala delle fasi a bassa connettività, superconduttori ionici.

Conducibilità dei semiconduttori.

#### *Parte IV Proprietà delle superfici*

Proprietà termodinamiche, equazione di Gibbs-Duhem ed isoterma di adsorbimento di Gibbs per la segregazione delle impurezze.

Struttura e proprietà elettronica delle superfici, ricostruzione.

Fenomeni e struttura elettronica delle superfici di isolanti e semiconduttori.

#### *Testi consigliati*

J. Crawford, L. Silfkin, Point Defects in Solids, Vol. 1° e 2°, Plenum Press, 1972.

P. Agullo-Lopez, C.R.A. Catlow, P. Towsend, Point Defects in Materials, Academic Press, 1988.

A. Zangwill, Physics at Surfaces, Cambridge University Press, 1988.

### **41. CHIMICA DEI COMPOSTI ETEROCICLICI (F11041)**

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 l'industria farmaceutica, antiparassitari, fitofarmaci, additivi, ecc.) sia di sistemi eterociclici presenti in alcune classi di composti naturali (alcaloidi, antibiotici, ecc.).

*Generalità*

Nomeclatura degli eterocicli. Eteroaromaticità definizione termodinamica e reazionale. Eterocicli elettronricchi ed elettronpoveri. Orbitali molecolari degli eterocicli. Combinazione lineare di O.M. 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, di frontiera, selettività alfa/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.

#### *Eterocicli pentatomici monoetero*

Furano. Pirolo. Tiofene. Sintesi (da composti 1,4-dicarbonilici secondo Knorr secondo Hantzsch, secondo Feist, da carboidrati da acetileni, da composti betadicarbonilici, per conversione di altri eterocicli).

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, addizioni 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 all'anello). Conversione anello furanico in pirrolico e piridinico.

Riduzione, ossidazione. Derivati funzionalizzati: sostituzioni nucleofile, pirrometeni, porfirinogeno. Idrossiderivati (tautomerie relative, angelicaltoni) 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. glutaconica, di Hantzsch e derivate da composti 1,5-dicarbonilici, di Guareschi, alchilpiridine, da derivati furanici, piranici e altre). Sintesi vitamina B6. Derivati naturali (NAD, nicotina e derivati).

Piridina, 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 ammidine, uree, tiouree e composti 1,3-dicarbonilici come tali e potenziali). Pirazina. Sintesi dell'anello (da  $\alpha$ -alogenoacetali, da composti  $\alpha$ -ammino carbonilici). Triazina simmetrica. Sintesi e proprietà di alcuni derivati. Cloruro di cianurile. Chinolina e Isochinolina. Metodi di sintesi dell'anello (sintesi di Skraup, di Doebner-Miller, di Friedlander, sintesi di Bischler, di Pictet, di Pomeranz-Fritsch). Cenni sulla sintesi di acridina, cinnolina (sali di o-acilbenzendiazonio), 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.

Azione funzionalizzate: reazioni delle funzioni e reattività da queste conferite all'anello. Gruppi alchilici (acidità, basi quaternarie, anidrobasi, condensazioni, alogenazione, reazioni di Michael), 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, cromomi, flavoni, antociani, conversione in piridoni, aromaticità.

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

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

nucleofile. Ossidazioni e riduzioni. Imidazoloni, tiazolidoni, ossazoloni. Idantoina. Reazioni delle funzioni (amminogruppi, alchili, tioli). Vitamina B1 (sintesi e trasformazioni). Cicloaddizioni. Purine (sintesi e proprietà). Prodotti naturali (acido urico, caffeina, teofillina, teobromina, xantina, ipoxantina, adenina, guanina, ATP, acidi nucleici) Vitamine B2. Isossazolo. Pirazolo. Sintesi (da composti beta-dicarbonilici, da inoni enoni ed equivalenti), per cicloaddizione (regio- e stereochimica delle cicloaddizioni 1,3-dipolari, nitrilossidi e nitrilimine e sintesi loro precursori, da diazocomposti, cenni acido fulminico), sostituzioni elettrofile, nucleofile. Metallazioni, apertura anello isossazolico. Riduzione, ossidazione. Pirazoloni (sintesi e reattività), isossazoloni.

#### *1,2,3 -1,2,4 - Triazol e Tetrazoli*

Sintesi (da aciltiosemicarbazidi e correlate, per cicloaddizione da azidi, varie). Acidità (acidi 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 sintomi nella sintesi organica.

#### *Testi di consultazione*

A. Abbotto, G. Pagani – Chimica Eterociclica – Piccin Editore – in stampa (1994).

### **42. CHIMICA DELLE SOSTANZE ORGANICHE NATURALI (F11042)**

PROF. PAOLO MANITTO

Metabolismo primario e secondario.

Metodi di indagine nello studio della biosintesi delle sostanze naturali. Uso dei radiosotopi. 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 cicloesanici ed iridoidi. Sesquiterpeni. Diterpeni. Triterpeni. Carotenoidi.

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

Metaboliti dell'acido scichimico. Biosintesi degli amminoacidi aromatici.

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

Pigmenti pirrolici. Porfirine. Clorofille. Pigmenti biliari.

#### *Testi consigliati*

K.G.B. Torsell, *Natural Product Chemistry*, 2nd Edition, Apotecar Societeten Stockholm, 1997

J. Mann, *Secondary Metabolism*, Clarendon Press, Oxford, 1987.

R.H. Thomson, *The Chemistry of Natural Product*, Blackie, London, 1985.

### **43. CRISTALLOCHIMICA (F11043)**

**NON ATTIVATO**

### **44. ELETTROCHIMICA (ORGANICA) (F11044)**

PROF. PAOLO LONGHI

Sistemi elettrochimici. Potenziali di ossido-riduzione; potenziale reversibile e potenziale standard; scale di potenziale in solventi diversi.

La regione interfase: trasferimento elettronico all'interfase elettrodo-soluzione e sua cinetica; fenomeni di adsorbimento. Step successivi elettrochimici e chimici e loro combinazioni nei processi ossidativi e riduttivi di substrati organici. Trasferimento di massa e cinetica delle reazioni elettrochimiche sotto controllo di trasporto di materia.

Metodi per lo studio delle reazioni elettro-organiche: polarografia, voltammetria ciclica, cronopotenziometria, cronoamperometria; l'elettrodo a disco rotante ed a disco e anello.

Aspetti meccanicistici delle reazioni catodiche e anodiche su substrati organici. Schemi per la rottura o formazione elettrochimica di legami tra atomi di C, H, O, N, S, alogeni in composti organici. Comportamento elettrochimico di classi rappresentative di composti organici.

Celle di elettrolisi per lo studio dei processi elettro-organici e per la preparativa su scala di laboratorio. Scelta del materiale elettrodico, del solvente dell'elettrolito di supporto. Elettrodi di riferimento di uso pratico.

Cenni di reattoristica per i processi elettro-organici industriali: elettrodi mono- e bipolari, bi- e tridimensionali; i tipi di celle industriali impiegabili per processi elettro-organici, rendimento di corrente e resa di reazione, bilancio energetico della cella; separazione dei prodotti e riciclo dei reagenti. Criteri di scelta tra metodi elettrochimici e metodi tradizionali di chimica organica per l'ottenimento di un prodotto.

Processi elettro-organici di interesse industriale: sintesi dell'adiponitrile dell'ac. sebacico, di composti perfluorurati.

Trattamento elettrochimico di biomasse. Polimerizzazione elettrochimica sull'elettrodo; polimeri conduttori ed elettrodi modificati chimicamente.

*Testi di consultazione:*

"Organic Electrochemistry; an introduction and a guide". H. Lund and M.M. Baizer eds., M. Dekker, 1991.

D. Pletcher, F.C. Walsh: "Industrial Electrochemistry" (cap. 6), Chapman and Hill, 1990.

**45. CHIMICA BIOINORGANICA (BIOCRISTALLOGRAFIA) (F11045)**

PROF. P.L. BELLON

In attesa programma

**46. CHIMICA BIOORGANICA (F11046)**

(Vedi programma 15.9)

**47. CHIMICA FISICA ORGANICA (F11047)**

**NON ATTIVATO**

**48. CHIMICA DELLE FERMENTAZIONI E MICROBIOLOGIA INDUSTRIALE (F11048)**

PROF.SSA BIANCA MARIA RANZI

*Biologia dei microorganismi industriali*

Cenni di struttura e morfologia dei microrganismi industriali.

Gruppi microbici di interesse industriale.

Metabolismo microbico primario e secondario e sua regolazione.

Miglioramento genetico dei microrganismi di interesse industriale.

Conservazione dei ceppi industriali.

*Sistemi di fermentazione*

Batch, coltura continua, fed-batch.

Cellule ed enzimi immobilizzati.

Bioreattore: monitoraggio, controllo.

Separazione e purificazione dei prodotti ottenuti.

*Fermentazioni anaerobie: biosintesi e tecnologia*

Etanolo.

Acido lattico.

Acetone - butanolo.

*Fermentazioni aerobie: biosintesi e produzione industriale*

Acidi organici: acido citrico, acido acetico.

Aminoacidi: acido glutammico.

Vitamine: vitamina C, riboflavina e vitamina B12.

Antibiotici: penicillina, tetraciclina.

Biotrasformazioni.  
Prodotti da DNA ricombinante.

*Testi*

Stainer, *Il mondo dei microrganismi*, Zanichelli  
Lehninger, *Principi di Biochimica*, Zanichelli  
Rainbow, Rose, *Biochemistry of industrial microorganism*, Academic Press  
Cruegher, *Biotechnology*, Science Tech. Inc.  
Wiseman, *Principles of biotechnology*, Surrey Un. Press  
Bu'Lock, *Basic Biotechnology*, Acad. Press  
Murooke, *Recombinant microbes for industrial and agricultural applications*, Marcel Dekker Inc.  
Il corso comprende anche esercitazioni su alcuni argomenti trattati.

**49. CHIMICA DELLO STATO SOLIDO (F11049)**

PROF. VLADIMIRO SCATTURIN

- 1) Principi costitutivi delle strutture cristalline
- 2) Gli elettroni nei solidi: legame chimico e proprietà elettroniche nei cristalli
- 3) Composti cristallini difettosi e non stechiometrici
- 4) Solidi mono e bidimensionali bidimensionali
- 5) Le zeoliti
- 6) Proprietà ottiche delle strutture solide
- 7) I solidi magnetici
- 8) La superconduttività e le strutture solide superconduttrici.

**50. CHIMICA INORGANICA (STRUTTURA E PROPRIETA' MOLEC. COMP. INORG.) (F11050)**  
**NON ATTIVATO**

**51. CHIMICA METALLORGANICA (F11051)**

DOTT. F. RAGAINI

Processi industriali e di laboratorio per la sintesi di prodotti chimici (fine chemicals e prodotti di base), che utilizzino complessi di metalli di transizione come catalizzatori in fase omogenea, con particolare attenzione ai processi industriali e alle reazioni enantioselettive.

Isomerizzazione delle olefine e loro polimerizzazione; idrogenazione (anche asimmetrica) di olefine, chetoni e immine; idrocianazione e idrosililazione (anche asimmetriche) di olefine; reazioni di acetileni e di idrocarburi aromatici; carbonilazione di alogenuri organici; carbonilazione del metanolo; reazioni di idroformilazione (anche asimmetrica); reazioni di carbosilazione di olefine; metatesi di olefine; ciclopropanazioni; catalisi omogenea nella chimica degli alogeno derivati organici; copolimerizzazione CO-olefine; sintesi del dimetilcarbonato; carbonilazione riduttiva di nitroareni; cenni di reattività organometallica di lantanidi e attinidi.

*Testo base*

G.W. Parshall e S.D. Ittel, *Homogeneous Catalysis*, 2<sup>nd</sup> edition, Wiley (1992).  
Parte del materiale didattico verrà fornito dal docente.

**52. CHIMICA ORGANICA FISICA (F11052)**

**NON ATTIVATO**

**53. CHIMICA ORGANICA (APPLICATA) (F11053)**

(vedi programma 15.4)

**54. ELETTROCHIMICA (F11054)**

(vedi programma 15.5)

## **55. CHIMICA ORGANICA (COMPLEMENTI) (F11055)**

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 e di sicurezza delle reazioni e dei prodotti.

Si tengono inoltre alcune lezioni sulla ricerca bibliografica, manuale e on-line.

Esperti dell'industria, di cui un professore a contratto, contribuiranno con lezioni su argomenti specifici allo svolgimento del corso.

Durante il corso potranno anche tenersi esercitazioni di vario tipo (ricerca bibliografica, progettazione di sintesi di prodotti industriali ecc.)

- 1) *Anti-infiammatori non steroidei*
  - Derivati dell'acido benzoico
  - Derivati degli acidi arilacetici
  - Derivati degli acidi arilpropionici
  - Derivati oxicam.
  
- 2) *Derivati con attività antibatterica*
  - A) Antibiotici -lattamici:
    - Penicilline e Penicilline semisintetiche
    - Cefalosporine e Cefalosporine semisintetiche
    - Penem e derivati
    - Tienamicina
    - Nocardicine
    - Monobattami
  - B) Antibiotici macrolidici
    - Eritromicina: sviluppo del processo biotecnologico di produzione.
  - C) Antibiotici vari (cenni)
    - Macrolidi
    - Amminoglicosidi
    - Tetracicline
    - Lincomicine
    - Polipeptidi
    - Altri
  - D) 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) *Fitofarmaci*



Caratteristiche generali, classificazione, cenni su meccanismi di azione.

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

Fungicidi  
Insetticidi  
Erbicidi

#### 5) *Ricerca bibliografica*

Metodi per il reperimento dell'informazione chimica. Fondamenti di organizzazione delle principali collezioni scientifiche.

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

### **56. CHIMICA ORGANICA (SUPERIORE) (F11056)**

PROF. FRANCESCO SANNICOLÒ

#### *Stereochimica statica:*

Simmetria molecolare e proprietà; Momento dipolare e quadrupolare; Enantiomorfismo; Attività ottica; Capacità stereoselettive; Segmentazione. Stereogenicità: elementi stereogenici rigidi. Simmetria locale: Achirotopicità e Chirotopicità. Prochiralità, Classi di prochiralità.

#### *Stereochimica dinamica*

##### *Stereoisomerismo residuo*

Sistemi ad ingranaggio dinamico. Sistemi triarilboranici e triarilmetanici; bis-tripticilmetani e bis-tripticileteri. Trattazione teorica dei meccanismi possibili di stereomerizzazione. Dimostrazione sperimentale dei meccanismi di stereomerizzazione preferenziali. Sintesi, isolamento e caratterizzazione di Stereoisomeri residui. Stereoisomeri residui chirali e achirali: Diastereoisomeri ed Enantiomeri residui.

##### *Stereoisomerismo topologico*

Generalità. Relazioni tra Stereoisomerismo euclideo e stereoisomerismo topologico, disimmetria topologica. Cenni sui grafi molecolari: grafi  $K_{3,3}$  e  $K_5$ . Legami topologici: sistemi a un circuito (nodi) e sistemi a circuiti multipli (catenani).

Strategie sintetiche di stereoisomeri topologici flessibili: sintesi statistiche, semistatistiche, template, attraverso strisce di Möbius. Sintesi significative di [2]- e [3]-catenani, di nodi a trifoglio e di strisce di Möbius. Caratterizzazione e proprietà di stereoisomeri topologici flessibili. Stereoisomeri topologici rigidi.

#### *Origini della omogeneità chirale in natura*

Teorie biotiche.

Teorie abiotiche:

a) meccanismi casuali

- modelli generali di rottura spontanea della simmetria
- modelli di rottura spontanea della simmetria nella cristallizzazione di racemi
- risoluzione spontanea totale di racemi
- reazioni controllate dal lattice in cristalli chirali
- reazioni in fasi coesoteriche
- adsorbimento enantioselectivo su quarzo
- adsorbimento enantioselectivo e polimerizzazione su argille

- b) meccanismi determinati
- violazione della parità
  - ipotesi Vebster-Ulbricht (radionuclidi naturali; radoracemizzazione; decadimento beta e cristallizzazione)
  - effetti diretti di radiazioni chirali (elettroni; protoni e muoni; positroni)
  - violazione di parità e proprietà degli enantiomeri (interazioni deboli, correnti neutre e differenze di energia tra enantiomeri: enantiomeri veri e falsi)
  - campi elettrici magnetici e gravitazionali
  - luce circolarmente polarizzata (fotorisoluzione parziale di racemi; sintesi asimmetrica fotochimica; fotolisi asimmetrica; sorgenti naturali di luce circolarmente polarizzata)

*Amplificazione di piccoli eccessi enantiomerici*

- durante evaporazione e precipitazioni
- durante reazioni incomplete
- durante autocatalisi stereoselettiva
- durante polimerizzazione

*Chimica e applicazioni dei cristalli liquidi*

Struttura e proprietà dei cristalli liquidi.

Relazione fra struttura chimica e fase liquida cristallina.

Interazione fra campi elettrici e magnetici e cristalli liquidi.

Applicazioni dei cristalli liquidi: in sistemi visivi, memoria ottica, in spettroscopia, in sistemi di indagine stereochimica come amplificatori di chiralità.

**57. CHIMICA DEI COMPOSTI ORGANOMETALLICI (F11057)**

PROF.SSA FULVIA ORSINI

- Il legame carbonio-metallo
- Tecniche di laboratorio in chimica organometallica
- Analisi e caratterizzazione strutturale dei composti organometallici
- Meccanismi delle reazioni dei composti organometallici
- Principali classi di composti organometallici e loro applicazioni in sintesi organica
- Composti organometallici dei metalli di transizione e loro applicazioni in sintesi organica
  - *Tipi di leganti*
  - *Addizione ossidativa-Eliminazione riduttiva*
  - *Reazioni di inserzione*
  - *Reazioni stechiometriche*
  - *Reazioni catalitiche*
  - *Complessi metallo di transizione-alchene*
  - *Complessi metallo di transizione-alchino*
  - *Complessi metallo di transizione-arene*
  - *Complessi metallo di transizione-allile*
- Lantanidi in sintesi organica
- Chimica bioorganometallica
- Monografie

Agli studenti verranno fornite come materiale didattico le fotocopie dei lucidi utilizzati per le lezioni.

**58. CHIMICA TEORICA (F11058)**

PROF. GABRIELE MOROSI

Obiettivi della chimica teorica.

L'Hamiltoniana: Hamiltoniana classica, Hamiltoniana nel sistema di laboratorio e Hamiltoniana interna.

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

La correlazione elettronica. Il metodo interazione di configurazione. I metodi Coupled Cluster. I metodi MC-SCF e UHF.

La matrice densità.

Teoria della perturbazione Moller-Plesset.

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.

I metodi Monte Carlo quantistici.

Hamiltoniana relativistica. L'equazione di Klein-Gordon. L'equazione di Dirac. I momenti magnetico e di spin dell'elettrone. Il fattore g. Effetti relativistici in chimica.

Cenni di teoria della collisione: trattazione classica, quantistica e semiclassica.

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

*Testi consigliati:*

R. McWeeny, Methods of molecular quantum mechanics.

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

R.E. Moss, Advanced molecular quantum mechanics.

## **59. MECCANISMI DI REAZIONE IN CHIMICA ORGANICA (F11059)**

PROF.SSA LUISA GARANTI

Il corso si propone di studiare le reazioni organiche unificandole tramite un numero relativamente piccolo di principi guida basati sul loro meccanismo.

Questo tipo di studio permette di razionalizzare e prevedere la reattività dei composti organici. Verranno trattati i processi di formazione dei legami, la stabilità e la reattività degli intermedi. l'effetto dei solventi.

Verranno studiate:

- a) reazioni ioniche; sostituzioni e addizioni nucleofile, sostituzioni e addizioni elettrofile, reazione di eliminazione, competizione tra reazioni di sostituzione e di eliminazione, competizione tra reazioni intermolecolari e intramolecolari;
- b) reazioni non ioniche: reazioni pericicliche e reazioni radicaliche;
- c) reazioni enzimatiche;
- d) reazioni fotochimiche.

## **60. STRUTTURISTICA CHIMICA (F11060)**

(Vedi programma 15.6)

## **61. METODI FISICI IN CHIMICA INORGANICA (F11061)**

**NON ATTIVATO**

## **62. SINTESI E TECNICHE SPECIALI INORGANICHE (F11062)**

**NON ATTIVATO**

## **63. SPETTROSCOPIA MOLECOLARE (F11063)**

PROF. GABRIELE MOROSI

1. La radiazione elettromagnetica e la sua interazione con la materia.

Assorbimento ed emissione di radiazione. Ampiezza della linea, effetti che portano al suo allargamento e loro rimozione.

2. Spettroscopia rotazionale.

Modelli di rotatore. Spettri rotazionali.

- Spettroscopia Raman rotazionale  
Determinazione della struttura molecolare a partire dalle costanti rotazionali.
3. Spettroscopia vibrazionale.  
Vibrazione di molecole biatomiche. Molecole poliatomiche: potenziale armonico e coordinate normali. Anarmonicità.  
Spettri IR 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 Koopmans. Spettroscopia ESCA.  
Spettroscopia Auger. EXAFS.
6. Lasers e spettroscopia laser.  
Trattazione generale dei lasers ed esempi di lasers.  
Uso dei lasers in spettroscopia: Raman stimolato, CARS, spettroscopie a molti fotoni, transistori ottici coerenti, spettroscopia di molecole in fasci molecolari. Femtochimica.

*Testo consigliato*

*Modern Spectroscopy* - 3rd edition - J. Michael Hollas.  
John Wiley & Sons.

#### **64. STEREOCHIMICA (ORGANICA) (F11064)** 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 analizzazione del decorso stereochimico;  
sintesi stereoselettive promosse da complessi di metalli di transizione;  
doppia stereoselezione;  
stereocontrollo nelle reazioni di riarrangiamento sigmatropico.

**65. CHIMICA FISICA (CRISTALLOCHIMICA) (F11078)**

**NON ATTIVATO**

## CONSIGLIO DEL CORSO DI LAUREA IN CHIMICA

### PRESIDENTE

Prof. Francesco Cariati – Dipartimento di chimica inorganica, metallorganica e analitica – Via Venezian, 21.

### SEGRETERIA DIDATTICA DEL C.C.L.

Via Venezian, 21

Orario 10-12 dal lunedì al venerdì

Informazioni, Orario delle lezioni, Domanda di entrata in tesi, Varie.

### RAPPRESENTANTI DEGLI STUDENTI NEL C.C.L.

Bertelli Marco

Cossettini Paola

Crema Laura

Fanigliulo Ameriga

Franco Letizia

Gagliardini Giordana

Lo Presti Leonardo

Tessaro Davide

Virdis Andrea

### COMMISSIONE PIANI DI STUDIO E TRASFERIMENTI

Prof. Francesco Sannicolò - Dip. Chim. Org. e Ind.

Prof.ssa Francesca Porta - Dip. Chim. Inorg. e Met.

Prof. Mario Raimondi - Dip. chimica fisica ed elettrochimica.

### COMMISSIONE PER LA TESI DI LAUREA

Prof. Francesco Sannicolò, Presidente - Dip. Chimica Organica E Industriale.

Prof. Alessandro Pasini - Dip. Chimica Inorganica E Metallorganica.

Prof. Gianfranco Tantardini - Dip. Chim. Fis. ed Elettrochim.

Prof. Angelo Sironi - Ist. Chimica Strutturistica Inorganica.

Prof. Torquato Mussini - Dip. Chimica Fisica Ed Elettrochimica.

ISCRITTI A CHIMICA PER L'A.A. 1998/99 (dati aggiornati al 22 luglio '98)

---

Anno di corso	I	II	III	IV	V	FC	TOTALE
	112	109	96	107	101	237	762

---

**ELENCO DEI CORSI E DOCENTI  
DEL CORSO DI LAUREA IN CHIMICA  
A.A. 1998/99**

n°anno codice insegnamento docenti

---

**TRIENNIO PROPEDEUTICO - Insegnamenti fondamentali**

1	1	F11001	ISTITUZIONI MATEMATICHE 1° CORSO	DE STEFANO	MAT
2	1	F11079	CHIMICA GENERALE E INORGANICA/	CENINI	CIMA
	1	F11080	LAB. CHIMICA GENERALE INORG. A-B	GARLASCHELLI	CIMA
3	2	F11003	FISICA GENERALE 1° CORSO	FAZIO	FIS4
4	1	F11004	ISTITUZIONI MATEMATICHE 2° CORSO	VERDI	MAT
5	1	F11081	CHIM. ANALITICA 1° CORSO/ LAB. CHIM. ANALITICA 1° CORSO	DOSSI	CIMA
6	2	F11006	FISICA GENERALE 2° CORSO/ LAB. FISICA GENERALE	MANDELLI RAGAZZI	FIS FIS
7	2	F11082	CALCOLO NUMERICO/E PROGRAMM.	DE TISI	MAT
8	1	F11008	CHIMICA ORGANICA 1° CORSO/ LAB. CHIMICA ORGANICA 1° CORSO A-B	SANNICOLO'	COI
9	2	F11083	CHIMICA FISICA 1° CORSO/	TANTARDINI	CFE
		F11084	LAB. CHIMICA FISICA 1° CORSO	LONGHI	CFE
10	2	F11010	CHIMICA INORGANICA 1° CORSO/ LAB. CHIMICA INORGAN. 1° CORSO A-B	CIANI CERIOTTI-PASINI	CSSI CIMA
11	3	F11011	CHIMICA FISICA 2° CORSO/ LAB. CHIMICA FISICA 2° CORSO A-B	FORMARO DESTRO	CFE CFE
12	3	F11012	CHIMICA ORGANICA 2° CORSO/ LAB. CHIMICA ORGANICA 2° CORSO A-B	GARANTI	COI
13	3	F11013	CHIMICA ANALITICA (2° CORSO/) LAB. CHIM. ANALITICA (2° CORSO)	CARIATI ZANDERIGHI	CIMA CIMA
14	3	F11014	CHIMICA BIOLOGICA 1° CORSO	CURTI	BIO
15	-	F11015	PROVA CONOSCENZA LINGUA INGLESE		

**TRIENNIO PROPEDEUTICO - Insegnamenti opzionali**

(possono essere scelti anche come opzionali del biennio)

15.1	3	F11022	CHIMICA COMPUTAZIONALE	PITEA	CFE
15.2	3	F11031	CHEMIOMETRIA	TODESCHINI	CFE
15.3	3	F11041	CHIMICA COMPOSTI COORDINAZIONE	MARTINENGO	CIMA
15.4	3	F11053	CHIMICA ORGANICA (APPLICATA)	VALCAVI	COI
15.5	3	F11054	ELETTROCHIMICA	MUSSINI	CFE
15.6	3	F11060	STRUTTURISTICA CHIMICA	SANSONI	CSSI
15.7	3	F11027	CHIMICA FISICA (COMPLEMENTI)	ORTOLEVA	CFE
15.8	3	F11033	CHIMICA TEORICA (QUANTISTICA)	M. SIRONI	CFE
15.9	3	F11046	CHIMICA BIOORGANICA	VALCAVI	COI
15.10	3	F12032	CHIMICA DELLE MACROMOLECOLE	FERRUTI	COI

---

n°	anno	codice	insegnamento	docenti
<b>BIENNIO DI APPLICAZIONE - Insegnamenti fondamentali d'indirizzo</b>				
16	4	F11016	CHIMICA INORGANICA 2° CORSO/ LAB. CHIMICA INORGANICA 2° CORSO	PASINI PORTA CIMA
17	4	F11017	CHIMICA INORGANICA 3° CORSO/ LAB. CHIMICA INORGANICA 3° CORSO	MORAZZONI SIRONI A. CSSI
18	4	F11018	CHIMICA FISICA 3° CORSO/ LAB. CHIMICA FISICA 3° CORSO	RAIMONDI ORTOLEVA CFE
19	4	F11019	CHIMICA FISICA 4° CORSO/ LAB. CHIMICA FISICA 4° CORSO	GIANINETTI OLIVA CFE
20	4	F11020	CHIMICA ORGANICA 3° CORSO/ LAB. CHIMICA ORGANICA 3° CORSO	RUSSO DEL BUTTERO COI
21	4	F11021	CHIMICA ORGANICA 4° CORSO/ LAB. CHIMICA ORGANICA 4° CORSO	SCOLASTICO PELIZZONI COI

*BIENNIO DI APPLICAZIONE - Insegnamenti opzionali*

22	4	F11022	CHIMICA COMPUTAZIONALE	PITEA CFE
23	4	F11023	METODI FISICA IN CHIMICA ORGANICA	DANIELI COI
24	5	F11024	CHIMICA BIOINORGANICA	
25	-	F11025	Chimica Fisica Ambientale	Non Attivato
26	4	F11025	(VEDI CHIMICA FISICA DEI MATERIALI DI CHIMICA IND..LE)	
27	4	F11027	CHIMICA FISICA (COMPLEMENTI)	ORTOLEVA CFE
28	4	F11028	CHIMICA INORGAN. (APPLICAZIONI)	TOLLARI CIMA
29	4	F11029	CHIMICA INORGAN. (COMPLEM.)	GARLASCHELLI CIMA
30	4	F11030	CHIMICA INORGAN. (CRISTALLOCHIM.)	SANSONI CSSI
31	4	F11031	CHEMIOMETRIA	TODESCHINI CFE
32	4	F11032	CHIMICA INORGAN. (REATTIVITA')	PORTA CIMA
33	4	F11033	CHIMICA TEORICA (QUANTISTICA)	M. SIRONI CFE
34	4	F11034	MECCANISMI REAZ. IN CHIM. INORG.	- CIMA
35	-	F11035	Mineralogia	Non Attivato
36	-	F11036	Stereochimica (Inorganica)	Non Attivato
37	4	F11037	SINTESI TECN. SPEC. ORGANICHE	SCOLASTICO COI
38	4	F11038	CHIM. FIS. SISTEMI DISP. INTERFASI	ARDIZZONE CFE
39	4	F11039	CHIMICA COMPOSTI COORDINAZIONE	MARTINENGO CIMA
40	4	F11040	CHIM. FIS. STATO SOLIDO SUPERFICI	PIZZINI CFE
41	4	F11041	CHIMICA DEI COMPOSTI ETEROCICLICI	PAGANI COI
42	4	F11042	CHIM. SOSTANZE ORGAN. NATURALI	MANITTO COI
43	-	F11043	Cristallochimica	Non Attivato
44	4	F11044	ELETTROCHIMICA (ORGANICA)	LONGHI CFE
45	5	F11045	CHIM. BIOINORG. (BIOCRISTALLOGR.)	BELLON CSSI
46	4	F11046	CHIMICA BIOORGANICA	VALCAVI COI
47	-	F11047	Chimica Fisica Organica	Non Attivato
48	4	F11048	CHIM. FERMENT. MICROBIOL. IND.LE	RANZI BIO
49	5	F11049	CHIMICA STATO SOLIDO	SCATTURIN CSSI
50	-	F11050	Chimica Inorganica (Struttura e Proprietà ...)	Non Attivato
51	4	F11051	CHIMICA METALLOORGANICA	F. RAGAINI CIMA
52	-	F11052	Chimica Organica Fisica	Non Attivato
53	4	F11053	CHIMICA ORGANICA (APPLICATA)	VALCAVI COI
54	4	F11054	ELETTROCHIMICA	MUSSINI CFE
55	4	F11055	CHIMICA ORGANICA (COMPLEMENTI)	MAIORANA COI
56	5	F11056	CHIMICA ORGANICA (SUPERIORE)	SANNICOLO' COI
57	4	F11057	CHIMICA COMPOSTI ORGANO-METALLICI	ORSINI COI
58	5	F11058	CHIMICA TEORICA	MOROSI CFR
59	5	F11059	MECCANISMI REAZ. CHIM. ORGANICA	GARANTI COI
60	4	F11060	STRUTTURISTICA CHIMICA	SANSONI CSSI
61	-	F11061	Metodi Fisici in Chimica Inorganica	Non Attivato
62	-	F11062	Sintesi e Tecniche Speciali Inorganiche	Non attivato



63	5	F11063	SPETTROSCOPIA MOLECOLARE	MOROSI	CFE
64	5	F11064	STEREOCHIMICA (ORGANICA)	COZZI	COI
65	-	F11078	Chimica Fisica (Cristallochimica)	Non Attivato	

---

**Dipartimenti, Istituti**

BIODIP = Dipartimenti via Celoria, 26

MAT = Dip. Matematica, via Saldini 50

FIS = Dip. Fisica, via Celoria 16

DST = Dip. Scienze della Terra, sez. Mineralogia, via Botticelli, 23

CIMA = Chimica Inorganica, Metallorganica e Analitica, via Venezian 21

CFE = Chimica Fisica ed Elettrochimica, via Venezian 21

COI = Chimica Organica e Industriale, via Venezian 21

CSSI = Chimica Strutturale Stereochimica Inorganica, via Venezian 21

DSA = Scienze dell'Ambiente e del Territorio, via Emanuelli, 15 (Bicocca)

DSM = Scienza dei Materiali, via Emanuelli, 15 (Bicocca)

**CORSO DI LAUREA IN  
CHIMICA INDUSTRIALE  
(F12)**

## MANIFESTO DEGLI STUDI A.A. 1998/99

### INFORMAZIONI GENERALI

**Ciclostilato e Guida dello studente a.a. 1998/99** Le prime informazioni sull'ordinamento degli studi del Corso di Laurea in Chimica Industriale sono nel "Manifesto degli Studi 1998/99" e nella "Guida dello Studente" in distribuzione presso le Segreterie - via Celoria, 20.

#### **Colloqui di Orientamento delle Matricole**

Ulteriori informazioni saranno date dai Docenti del Corso di Laurea nei *Colloqui di Orientamento delle Matricole* previsti per il giorno 10 settembre 1998, alle ore 15, presso il Settore Didattico in via Celoria, 20.

#### **Immatricolazioni**

I moduli per l'immatricolazione si ritirano e si consegnano (debitamente compilati e documentati) all'UFFICIO MATRICOLA, in via Festa del Perdono 7, (orario 9.00-12.00) dal 1° Agosto 1998.

#### **Date di inizio e fine dei corsi**

1° Semestre: dal 28.9.1998 al 20.1.1999

2° Semestre: dal 1.3.1999 al 11.6.1999

#### **Orario Lezioni**

Gli orari delle lezioni sono esposti nell'atrio di via Venezian, 21.

#### **Programmi degli Insegnamenti**

I programmi degli insegnamenti di Chimica Industriale saranno riportati nel Libretto "Piani di Studio... 98-99" in corso di stampa e in distribuzione presso la Libreria del Settore Didattico.

#### **Calendario appelli esami di profitto**

A.A. 1997/98	Settembre 1998:	2 appelli	II Sessione
	Gennaio 1999:	1 appello	III Sessione
A.A. 1998/99	Febbraio 1999:	2 appelli	I Sessione
	Giugno 1999:	1 appello	"
	Luglio 1999:	2 appelli	"
	Settembre 1999:	2 appelli	II Sessione
	Gennaio 2000:	1 appello	III Sessione

### **Calendario entrate in tesi e sedute di laurea**

<i>A.A.</i>	<i>Tesi presentazione domande</i>	<i>entrata</i>	<i>Lauree sedute</i>
1997/98	1-31 ottobre 1998 1-31 gennaio 1999	novembre 98 febbraio 99	28-29-30 ottobre 1998 11-12 marzo 1999
1998/99	1-30 aprile 1999 1-30 giugno 1999 1-31 ottobre 1999 1-31 gennaio 2000	maggio 99 luglio 99 novembre 99 febbraio 2000	27-28 maggio 1999 15-16 luglio 1999 20-21-22 ottobre 1999 - febbraio 2000

### **Iscrizione agli esami e ai laboratori e presentazione dei piani di studio**

Di norma, l'iscrizione agli appelli d'esame viene effettuata tramite terminali self.service del SIFA installati in tutto l'Ateneo. Si ricorda che le iscrizioni agli appelli d'esame si chiudono, di norma, cinque giorni prima della data d'esame. Dal mese di settembre 1998 l'iscrizione ai laboratori avverrà, in via sperimentale, tramite terminale SIFA. I piani di studio si presentano, salvo casi particolari, tramite terminale SIFA.

### **Informazioni sulla didattica**

Per informazioni su orari, programmi e tutto ciò che riguarda la didattica rivolgersi alla Segreteria Didattica del Corso di Laurea in Chimica Industriale (atrio via Venezian 21 - aperta al pubblico tutti i giorni dalle 10 alle 12).

## 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 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

### RECENTI MODIFICHE AL NUOVO ORDINAMENTO

Con l'a.a. 1996/97 l'organizzazione degli studi ha subito delle modifiche. In particolare, gli insegnamenti di "Chimica Industriale I" e "Laboratorio di Chimica Industriale I" danno luogo a due esami disgiunti; l'insegnamento di "Processi e Impianti Industriali Chimici I", con il relativo Laboratorio, è passato dal III anno al IV anno di corso, e l'insegnamento di "Processi e Impianti Industriali Chimici II" è passato dal IV anno al V anno di corso.

Pertanto lo studente, per il conseguimento della Laurea in Chimica Industriale, deve superare almeno 25 esami corrispondenti ad insegnamenti teorici e di laboratorio impartiti nell'Università degli Studi di Milano, tenendo conto delle norme qui di seguito riportate. Lo studente deve inoltre superare la "Prova di conoscenza della Lingua Inglese".

Si terrà tuttavia conto che fino all'a.a. 1995/96 gli insegnamenti di "Chimica Industriale I" e "Laboratorio di Chimica Industriale I" hanno comportato un solo voto d'esame.

Dall'a.a. 1997/98 l'insegnamento di "Chimica Organica 2° corso" è diventato annuale e viene impartito sia al primo sia al secondo semestre del 3° anno. Per poter frequentare il "Laboratorio di Chimica Organica 2° corso" lo studente dovrà aver superato l'esame di "Chimica Organica 1° corso/Laboratorio di Chimica Organica 1° corso". I corsi di "Chimica Organica 2° corso" e "Laboratorio di Chimica Organica 2° corso" danno luogo ad un unico esame. Tale modifica è stata effettuata per permettere agli studenti di affrontare le esperienze di laboratorio con una migliore conoscenza delle teorie.

Per il 1998/99 l'indirizzo "Elettrochimica e Chimica Fisica Applicate" non è più articolato in due orientamenti. E' compito dello studente che desideri scegliere questo Indirizzo darsi l'orientamento più adeguato attraverso la scelta degli insegnamenti opzionali, come per gli altri indirizzi.

## ORGANIZZAZIONE DEGLI STUDI SECONDO LO STATUTO

Avvertenza: La numerazione tra <> si riferisce agli esami da sostenere (17 nel Triennio e 8 nel Biennio).

### TRIENNIO DI STUDI PROPEDEUTICI

#### Primo anno 1° Semestre

<i>Insegnamento</i>	<i>Esame n°</i>
F12001 Istituzioni di Matematiche 1° corso	<1>
F12002 Chimica Generale ed Inorganica	<2>
” Laboratorio di Chimica Generale ed Inorganica	

#### 2° Semestre

F12003 Chimica Analitica	<3>
” Laboratorio di Chimica Analitica	
F12004 Fisica Generale 1° corso	<4>
F12005 Istituzioni di Matematiche 2° corso	<5>

#### Secondo anno 1° Semestre

<i>Insegnamento</i>	<i>Esame n°</i>
F12006 Fisica Generale 2° corso	<6>
” Laboratorio di Fisica Generale	
F12007 Calcolo Numerico e Programmazione	<7>
F12008 Chimica Organica 1° corso	<8>
” Laboratorio di Chimica Organica 1° corso	

#### 2° Semestre

F12009 Chimica Fisica 1° corso	<9>
F12010 Chimica Analitica Strumentale	<10>
” Laboratorio di Chimica Analitica Strumentale	
F12011 Chimica Biologica	<11>

#### Terzo anno 1° Semestre

<i>Insegnamento</i>	<i>Esame n°</i>
F12012 Chimica Fisica 2° corso	<12>
” Laboratorio di Chimica Fisica	
F12013 Chimica Organica 2° corso	<13>
F12014 Chimica Fisica Industriale	<14>

#### 2° Semestre

F12013 Chimica Organica 2° corso	<13>
” Laboratorio di Chimica Organica 2° corso	
F12073 Chimica Industriale I	<15>
F12074 Laboratorio di Chimica Industriale I	<16>
F12017 Chimica Inorganica	<17>
” Laboratorio di Chimica Inorganica	

e, inoltre:

F12066 Prova di Conoscenza della Lingua Inglese	
---	--

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 2°
- <17> Chimica Inorganica e Laboratorio di Chimica Inorganica

### BIENNIO DI STUDI DI APPLICAZIONE

#### Quarto anno 1° Semestre

*Insegnamento*

*Esame n°*

- |        |   |                    |
|--------|---|--------------------|
| F12016 | Processi e Impianti Industriali Chimici I       | <18> *             |
| "      | Lab. di Processi e Impianti Industriali Chimici |                    |
| F12018 | Chimica Industriale II                          | <19> *             |
| "      | Lab. Chimica Industriale II                     |                    |
|        | 1 insegnamento Opzionale                        | <20>               |
|        |   | <b>2° Semestre</b> |
|        | 1 insegnamento caratterizzante d'Indirizzo      | <21>               |
|        | + rispettivo laboratorio                        |                    |
|        | 1 insegnamento opzionale                        | <22>               |

#### Quinto anno 1° Semestre

*Insegnamento*

*Esame n°*

- |        |  |        |
|--------|--|--------|
| F12019 | Processi e Impianti Industriali Chimici II | <23> * |
|        | 1 insegnamento Opzionale                   | <24>   |
|        | 1 insegnamento Opzionale                   | <25>   |

\* = Corsi Fondamentali comuni a tutti gli Indirizzi del Biennio

“Processi e Impianti Industriali Chimici I” e “Laboratorio di Processi e Impianti Industriali” così come “Chimica Industriale II” e “Laboratorio di Chimica Industriale II” danno assieme luogo ad un unico esame.

### AMMISSIONE AL BIENNIO

Per essere ammessi al IV anno (cioè al Biennio di Applicazione) gli studenti dovranno sostenere entro il 31 Gennaio 1999 almeno 13 esami del Triennio Propedeutico. In particolare, dovranno aver superato tutti gli esami dei primi tre semestri eccetto “Fisica Generale 2° corso + Laboratorio di Fisica Generale”. La “Prova di Conoscenza della Lingua Inglese” è esclusa dal conteggio degli esami utili all'ammissione al IV anno.

Prima di sostenere gli esami del Biennio lo studente deve superare tutti gli esami del Triennio, meno uno, rispettando le propedeuticità elencate più avanti.

## PIANO DI STUDIO

All'atto dell'iscrizione al IV anno, lo studente deve effettuare la scelta di uno degli Indirizzi previsti presentando un piano di studi che, nell'ambito delle discipline attivate, rispetti il previsto numero di Insegnamenti e il rapporto tra Corsi di Lezioni e di Laboratorio.

### INDIRIZZI DEL BIENNIO

Il Biennio presenta i seguenti quattro Indirizzi:

- 1) **RICERCA E SVILUPPO DEI MATERIALI**
- 2) **RICERCA E SVILUPPO DEI PRODOTTI**
- 3) **CHIMICO-BIOTECNOLOGICO**
- 4) **ELETTROCHIMICA E CHIMICA FISICA APPLICATE**

I piani di studio di seguito elencati sono quelli consigliati per ottenere una formazione scientifica rigorosamente pertinente ai vari argomenti.

In ciascun Indirizzo lo studente ha, tuttavia, la facoltà di inserire *1 Insegnamento Libero* da scegliere tra tutti i corsi opzionali di tutti gli Indirizzi di Chimica e di Chimica Industriale.

Per ciascun insegnamento è riportato nell'ultima colonna l'anno di corso e il semestre in cui esso viene impartito secondo il piano didattico generale.

Lo studente, compatibilmente con il rispetto di eventuali propedeuticità e con le esigenze di frequenza, ha la facoltà di poter seguire i vari insegnamenti anche in un anno diverso.

#### **Indirizzo: Ricerca e sviluppo dei materiali**

In questi ultimi anni la richiesta, da parte dell'industria, di laureati con specifiche conoscenze in Scienze dei Materiali ha suggerito l'istituzione di un Indirizzo in Ricerca e Sviluppo dei Materiali. Questo indirizzo è volto alla formazione di laureati interessati a svolgere attività produttiva o di ricerca nel settore dei materiali inorganici, organici e polimerici con particolare riferimento alla loro preparazione e caratterizzazione. Il contenuto dell'indirizzo è finalizzato a soddisfare le necessità di industrie e centri di ricerca operanti nei più diversificati campi dei materiali tradizionali e innovativi.

#### **Caratterizzanti d'Indirizzo**

<i>Codice</i>	<i>Insegnamento</i>	<i>anno/semestre</i>	<i>esame n°</i>
F12020	Chimica Fisica dei Materiali	4°/II	<21>
"	Laboratorio di Chimica Fisica dei Materiali	4°/II	
F12032	Chimica delle Macromolecole	4°/II	<22>
<i>oppure</i>			
F12024	Chimica delle Macromolecole	4°/II	<21>
"	Laboratorio di Chimica delle Macromolecole	4°/II	
F12028	Chimica Fisica dei Materiali	4°/II	<22>



<i>Codice</i>	<i>Insegnamento</i>	<b>Opzionali</b>	
		<i>anno</i>	<i>esame n°</i>
	Primo Opzionale	4°	<20>
	Secondo Opzionale	5°	<24>
	Terzo Opzionale	5°	<25>

Due Opzionali almeno vanno scelti tra quelli della lista sottostante e non più di 1 Opzionale tra tutti gli insegnamenti di Chimica e di Chimica Industriale.

*Lista degli Opzionali:*

F12035	Scienza dei Metalli	4°/I
F12021	Chimica Organica Industriale	4°/II
F12031	Elettrochimica	4°/II
F12042	Corrosione e Protezione Materiali Metallici	5°/I
F12044	Chimica Inorganica (dei Materiali)	5°/I
F12072	Chimica e Tecnologia dei Polimeri	5°/I
F11038	Chimica Fisica Sistemi Dispersi e Interfasi	(°°)
F11040	Chimica Fisica Stato Solido e Superfici	(°°)

(°°) del Corso di Laurea in Chimica

**Indirizzo: Ricerca e sviluppo dei prodotti**

Questo indirizzo ha lo scopo di preparare laureati che siano specialisti nell'analisi, progettazione e produzione di molecole di grande interesse applicativo, utilizzando metodologie e strategie di sintesi avanzate e innovative nel campo della chimica fine, che costituisce attualmente la parte traente dell'industria chimica. Questi laureati avranno competenze per presiedere alle fasi di sviluppo (impianti pilota) e di produzione (impianti produttivi) delle molecole progettate e per interagire in maniera non subalterna con le altre funzioni aziendali (ingegneri, ecc.) coinvolte nell'iter di ricerca, sviluppo, produzione e commercializzazione di principi attivi, in particolare quelli ad elevato valore aggiunto. L'acquisizione di dette competenze apre al laureato chimico l'accesso ai più svariati settori industriali quali il farmaceutico, l'agrochimico, il settore degli additivi e ausiliari oltre ai settori dei materiali per l'elettronica e dell'ecologia.

**Caratterizzanti d'Indirizzo**

<i>Codice</i>	<i>Insegnamento</i>	<i>anno/semestre</i>	<i>esame n°</i>
F12021	Chimica Organica Industriale	4°/II	<21>
F12025	Chimica Organica Applicata	4°/II	<22>
"	Lab. Chimica Organica Applicata	4°/II	

<i>Codice</i>	<i>Insegnamento</i>	<i>anno</i>	<b>Opzionali</b>
			<i>esame n°</i>
	Primo Opzionale	4°	<20>
	Secondo Opzionale	5°	<24>
	Terzo Opzionale	5°	<25>

Almeno due Opzionali vanno scelti tra quelli della lista sottostante e non più di 1 Opzionale tra tutti gli Insegnamenti di Chimica e di Chimica Industriale.

*Lista degli Opzionali:*

F12038	Chimica Organica III	4°/I
F12032	Chimica delle Macromolecole	4°/II

F12039	Chimica Metallorganica	4°/II
F12070	Chimica dei Composti Organometallici	4°/II
F12048	Sintesi e Tecniche Speciali Inorganiche	5°/I
F11041	Chimica dei Composti Eterociclici	(°°)
F11048	Chimica Fermentazioni e Microbiol. Ind.le	(°°)

(°°) del Corso di Laurea in Chimica

### **Indirizzo: Chimico-Biotecnologico**

Questo indirizzo si propone di dare una specializzazione integrata chimica-biologica. Esso è rivolto alla formazione di laureati destinati alla ricerca di nuovi prodotti, alla individuazione di processi biotecnologici innovativi e alla messa a punto di tecnologie più economiche e meno inquinanti. Sbocchi professionali: nelle industrie chimiche, farmaceutiche, alimentari e nello studio dei problemi connessi con la tutela e la bonifica del territorio, in laboratori di ricerca ed enti pubblici.

### **Caratterizzanti d'Indirizzo**

<i>Codice</i>	<i>Insegnamento</i>	<i>anno/semestre</i>	<i>esame n°</i>
F12022	Chimica Ferment. e Microbiologia Ind.le	4°/II	<21>
"	Laboratorio di Chimica Ferm. e Micr. Ind.le	4°/II	
F11042	Chimica Sostanze Organiche Naturali	4°/I	<22>

*oppure*

F12026	Chimica Sostanze Organiche Naturali	4°/I	<21>
"	Laboratorio di Chimica Sostanze Org. Nat.	4°/II	
F11048	Chimica Ferment. e Microbiologia Ind.le	4°/II	<22>

### **Opzionali**

Due Opzionali almeno vanno scelti tra quelli della lista sottostante e non più di 1 Opzionale tra tutti gli insegnamenti di Chimica e di Chimica Industriale

<i>Codice</i>	<i>Insegnamento</i>	<i>anno</i>	<i>esame n°</i>
	Primo Opzionale	4°	<20>
	Secondo Opzionale	5°	<24>
	Terzo Opzionale	5°	<25>

*Lista degli Opzionali:*

F12038	Chimica Organica III	4°/I
F12033	Chimica Organica Applicata	4°/II
F12040	Chimica dei Processi Biotecnologici	4°/II
F12049	Cinetica Chimica e Dinamica Molecolare	4°/II
F12050	Biochimica Industriale	4°/II
F09038	Metodologia Biochimica	(++)
F09034	Biologia Molecolare	(++)
F11046	Chimica Bio-Organica	(°°)
F11024	Chimica Bio-Inorganica	(°°)

(++) del Corso di Laurea in Scienze Biologiche

(°°) del Corso di Laurea in Chimica

### **Indirizzo: Elettrochimica e Chimica Fisica Applicate**

Questo Indirizzo è rivolto allo studio degli aspetti tecnici ed economici relativi allo sviluppo:

a) dei processi chimici industriali, in particolare dei processi catalitici, dalla scala di laboratorio all'impianto pilota, ai principi per il passaggio alla scala industriale

b) delle tecnologie elettrochimiche nei vari campi di applicazioni analitiche, di sintesi, energetiche, ecc.

c) dei problemi di preparazione e impiego dei materiali metallici, con particolare riguardo ai fenomeni di corrosione.

Particolare riguardo viene rivolto ai vincoli ecologici che debbono concorrere a guidare le scelte per il progetto finale.

Sbocchi professionali: reparto di ricerca e sviluppo delle industrie chimiche ed elettrochimiche, galvaniche, metallurgiche; progettazione e produzione di generatori e sensori elettrochimici; sviluppo di processi, in particolare catalitici ed elettrocatalitici; progettazione e gestione di impianti pilota; conduzione di impianti industriali; specialisti dei problemi di corrosione; uffici brevettazione.

Con una opportuna scelta degli insegnamenti opzionali lo studente ha la possibilità di dare al proprio piano di studi l'orientamento culturale più aderente alle proprie inclinazioni.

#### **Caratterizzanti d'Indirizzo**

<i>Codice</i>	<i>Insegnamento</i>	<i>anno/semestre</i>	<i>esame n°</i>
F12023	Elettrochimica	4°/II	<21>
"	Laboratorio di Elettrochimica	4°/II	
F12034	Chimica Fisica della Catalisi	4°/II	<22>

oppure

F12027	Chimica Fisica della Catalisi	4°/II	<21>
"	Labor. di Chimica Fisica della Catalisi	4°/II	
F12031	Elettrochimica	4°/II	<22>

#### **Opzionali**

Lo studente dovrà scegliere in alternativa uno dei gruppi di insegnamenti caratterizzanti, e 3 opzionali. Di questi ultimi, lo studente ha facoltà di sceglierne non più di 1 tra tutti gli insegnamenti di Chimica e Chimica Industriale.

<i>Codice</i>	<i>Insegnamento</i>	<i>anno</i>	<i>esame n°</i>
	Primo Opzionale	4°	<20>
	Secondo Opzionale	5°	<24>
	Terzo Opzionale	5°	<25>

#### *Lista degli Opzionali:*

F11038	Chimica Fisica Sistemi Dispersi e Interfasi	(°°)
F12071	Chimica Fisica Stato Solido e Superfici (per la Catalisi)	4°/II
F12049	Cinetica Chimica e Dinamica Molecolare	4°/II
F12041	Misure Elettriche (sospeso per l'a.a.98/99)	4°/II
F12035	Scienza dei Metalli	4°/I
F12042	Corrosione e Protezione Materiali Metallici	5°/I
F12047	Elettrochimica (Industriale)	5°/I
F12053	Fotochimica	5°/I
F12054	Metallurgia	5°/I

(°°) del Corso di Laurea in Chimica

#### **PROPEDEUTICITA' DEGLI ESAMI (fino al 4° anno)**

Tutti gli esami contrassegnati “1° corso” devono essere sostenuti prima di quelli contrassegnati “2° corso”, esclusa la Chimica Fisica 1° corso e la Chimica Fisica 2° corso, i cui contenuti sono indipendenti l’uno dall’altro.

**È tassativa l’osservanza della propedeuticità tra i seguenti esami:**

- Chimica Organica 1° corso + Lab.      *va sostenuto prima di*  
Chimica Biologica
- Chimica Fisica Industriale              *va sostenuto prima di*  
Processi e Impianti Industriali  
Chimici I + Lab.
- Istituzioni di Matematiche 1° corso  
e Fisica Generale 2° corso + Lab.      *Devono essere sostenuti prima di*  
Chimica Fisica Industriale  
e Chimica Fisica 2° corso + Lab.
- Chimica Organica 1° corso + Lab.      *va sostenuto prima di frequentare*  
Lab. di Chimica Organica 2° corso

**È caldamente raccomandato sostenere l’esame di:**

- Chimica Generale ed Inorganica + Lab. *Prima di:*  
Chimica Organica 1° corso + Lab.
- Chimica Generale ed Inorganica + Lab. *Prima di:*  
Chimica Analitica + Lab.
- Istituzioni di Matematiche 1° corso      *Prima di:*  
Chimica Analitica + Lab.

**PRESENTAZIONE DEL PIANO DI STUDIO**

I piani di studio e le variazioni ai piani di studio, anche mediante domanda per esposto, si presentano dal 1° agosto al 31 dicembre per i soli studenti iscritti al 4° anno. Per la presentazione dei piani di studio vanno utilizzati, di norma, i terminali SIFA.

L'ultima modifica potrà essere richiesta all'inizio dell'Anno Accademico di conseguimento della Laurea. Gli esami degli insegnamenti inseriti con modifica del Piano di studio potranno essere sostenuti solo a partire dalla 1° sessione dell'anno accademico all'inizio del quale la richiesta è stata approvata. La stessa procedura vale anche per le modifiche richieste mediante domanda per esposto.

## **AMMISSIONE AL LABORATORIO DI TESI**

Nel Biennio lo studente, dopo aver superato il n° minimo di esami stabilito dal Regolamento Tesi di Laurea, deve svolgere un lavoro di tesi sperimentale della durata di un anno solare su argomenti attinenti l'Indirizzo o il Piano di Studio prescelto.

## **ESAME DI LAUREA**

Per essere ammesso all'Esame di Laurea lo studente deve aver seguito i Corsi e superato i 17 Esami di tutti gli Insegnamenti Fondamentali del Triennio Propedeutico, aver seguito i corsi e superato i 3 esami dei Corsi Fondamentali del Biennio e aver seguito e superato i 5 esami degli insegnamenti di Indirizzo (di cui uno relativo a un corso caratterizzante d'indirizzo e relativo laboratorio) per un totale di 25 esami registrati, oltre al superamento della "Prova di Conoscenza della Lingua Inglese".

## **SECONDA LAUREA IN CHIMICA INDUSTRIALE**

(Per laureati in Chimica)

Per il riconoscimento della laurea in Chimica ai fini del conseguimento di una seconda laurea in Chimica Industriale si richiede il superamento dei seguenti esami:

F12014 Chimica Fisica Industriale

F12073 Chimica Industriale I

F12074 Lab. Chimica Industriale I

F12016 Processi e Impianti Industriali I / Lab. Processi e Impianti Ind.li

F12018 Chimica Industriale II / Lab. Chimica Industriale II

F12019 Processi e Impianti Industriali II

1 Insegnamento Caratterizzante d'Indirizzo/relativo Laboratorio

e, inoltre, lo svolgimento di una tesi di laurea sperimentale o compilativa.

L'esatto elenco degli esami da superare verrà comunque stabilito dal Consiglio del Corso di Laurea in Chimica Industriale, su proposta della Commissione Piani di Studio e sulla base dei curriculum studi dei richiedenti, che verranno comunque iscritti al 4° anno con l'obbligo della frequenza di tutti i corsi e laboratori indicati.

Milano, Luglio 1998

**IL PRESIDE**  
FACOLTA' SCIENZE M.F.N.  
(prof. Marcello FONTANESI)

**IL PRESIDENTE CCL**  
CHIMICA INDUSTRIALE  
(prof. Paolo BELTRAME)

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

Per essere ammesso al laboratorio di laurea lo studente deve aver superato gli esami:

- del Triennio Propedeutico + la Prova di Conoscenza della lingua Inglese
- del Biennio Applicativo esclusi cinque esami a scelta tra fondamentali irrinunciabili e opzionali, dei quali comunque siano stati frequentati gli eventuali laboratori (presentare in questo caso una dichiarazione di frequenza rilasciata dal docente del laboratorio).

Le tesi di laurea si distinguono in:

- 1) Tesi Sperimentali, Interne o Esterne
- 2) Tesi Compilative

### *1) Tesi di laurea sperimentali*

Consistono in una dissertazione scritta sulle ricerche originali compiute dallo studente sotto la guida del Relatore e del Correlatore:

- a. Sono considerate TESI SPERIMENTALI INTERNE quelle svolte presso gli Istituti e i Dipartimenti Chimici della Facoltà di Scienze MM.FF.NN. dell'Università di Milano che fanno capo al Gruppo Chimico.
- b. Sono considerate TESI SPERIMENTALE ESTERNE quelle svolte presso altri. Istituti/Dipartimenti della Facoltà di Scienze MM.FF.NN. o presso Istituti/Dipartimenti di carattere chimico di altre Facoltà dell'Università di Milano o di altre Università o Istituti Superiori o presso i Laboratori a carattere chimico di Enti Pubblici di Ricerca.

### *2) Tesi di laurea compilative*

Consistono 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 e del Correlatore.

### *Relatori ufficiali*

Per qualsiasi tipo di tesi potranno essere tutti i Docenti ufficiali di materie chimiche del Corso di Laurea in Chimica Industriale e anche di altri Corsi di Laurea o i Ricercatori confermati, purché operino all'interno degli Istituti/Dipartimenti Chimici. Le domande di ammissione dovranno venire approvate dal Consiglio di Corso di Laurea, previo parere favorevole della Commissione Tesi che ne esaminerà la congruità. Il tempo richiesto per lo svolgimento della tesi di laurea è un anno solare.

### **Tesi sperimentali interne**

Lo studente, per essere ammesso al laboratorio di tesi, deve farne domanda indicando l'Istituto o il Dipartimento presso il quale intende svolgere la tesi, l'argomento delle ricerche e il nome del Relatore e del Correlatore. Il Relatore e/o il Correlatore devono sottoscrivere la domanda. Con la firma apposta alla domanda 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 Correlatori di Tesi sperimentali Interne tutti i Docenti inclusi nella categoria dei Relatori Ufficiali, i Ricercatori, gli Assistenti dell'Università di Milano e i Docenti Ufficiali di altre Università (e Politecnici) anche straniere e, inoltre, il personale laureato non docente, cultore della materia, dipendente dall'Università di Milano, con livello uguale o superiore al 7° o dal C.N.R. con livello equivalente, operante nei Dipartimenti Chimici. Casi speciali potranno essere presi in considerazione dal CCL, qualora vengano coinvolte persone di particolare rilevanza scientificotecnica”.

L'orario di frequenza al laboratorio viene fissato dal Relatore e/o dal Correlatore, tenuto conto del tipo della ricerca e degli impegni didattici dello studente.

Prima della discussione pubblica della tesi, il Relatore e il Correlatore devono far pervenire al Presidente della Commissione Esami di Laurea un giudizio motivato sull'operato del candidato e la propria proposta sull'incremento del voto finale di laurea.

### **Tesi sperimentali esterne**

Su richiesta motivata dello studente la Commissione Tesi può autorizzare lo svolgimento della tesi sperimentale al di fuori degli Istituti/Dipartimenti Chimici, nelle sedi indicate al paragrafo 1.b).

Le tesi dovranno essere condotte sotto la guida di un Relatore ufficiale e di un Correlatore, cultore della materia, appartenente all'Ente ospitante.

Alla domanda di ammissione al laboratorio di tesi esterna lo studente deve allegare:

- motivazione della richiesta di tesi sperimentale esterna (una cartella dattiloscritta) firmata dallo studente
- programma dettagliato delle ricerche (una cartella dattiloscritta) firmata dal Correlatore
- una dichiarazione del responsabile dell'Ente ospitante che attesti la disponibilità ad ospitare gratuitamente il laureando e a concedergli, sempre a titolo gratuito, l'uso delle attrezzature scientifiche.

L'estensione della copertura assicurativa sarà richiesta d'ufficio al Rettore non appena il Consiglio del Corso di Laurea avrà approvato la domanda.

La Commissione Tesi valuta 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 studi, l'impossibilità di svolgere lo stesso argomento o argomenti affini presso gli Istituti/Dipartimenti Chimici.

Almeno un mese prima della data di discussione della tesi, lo studente illustrerà i risultati ottenuti alla presenza del Relatore e del Correlatore, dandone preventivamente notizia alla Commissione Tesi.

In quella sede il Relatore e il Correlatore formulano il proprio giudizio e la proposta di incremento del voto di laurea da presentare alla Commissione di Laurea.

### **Tesi compilative**

Lo studente che desidera svolgere la tesi compilativa deve motivare la sua richiesta e 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 Ufficiale. Il Relatore e il Correlatore devono a loro volta firmare la domanda.

Il Correlatore per le tesi compilative viene nominato dalla Commissione Tesi e scelto tra le persone indicate come Correlatori di tesi sperimentali interne.

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:

- in occasione della definizione dell'argomento di tesi e della programmazione della ricerca bibliografica
- dopo la raccolta del materiale bibliografico e prima della sua organizzazione
- 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, dandone preventivamente notizia alla Commissione Tesi. Dopo tale relazione, il relatore e il correlatore potranno accettare la tesi, proporre 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.

Relatore e Correlatore cureranno di far pervenire alla Commissione di Laurea la propria proposta per l'incremento del voto di laurea.

### **Altre disposizioni**

La tesi di laurea compilativa può essere svolta anche da quegli studenti che, dopo aver scelto una tesi sperimentale non potessero continuare le ricerche di 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 norma 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 intendano proporre autonomamente gli argomenti di ricerca per la tesi di laurea devono allegare alla domanda di ammissione una richiesta motivata e una illustrazione dell'argomento di ricerca e delle metodologie

impiegate, oltre ad ogni elemento che possa risultare utile. La Commissione Tesi 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.

Eventuali casi anomali verranno esaminati dalla Commissione Tesi che formulerà le proprie decisioni e le sottoporrà all'approvazione del CCL.

#### **Calendario lauree e ingressi in tesi per il 1998**

Le ammissioni in tesi avvengono nei mesi di Maggio, Luglio, Novembre e Febbraio di ogni Anno Accademico, in concomitanza con le Sedute di Laurea. Le domande di ammissione in tesi, complete di tutta la documentazione richiesta, devono essere presentate tassativamente alla Segreteria Didattica entro le date riportate nel Manifesto degli Studi, tra le Informazioni generali.



**CORSO DI LAUREA IN CHIMICA INDUSTRIALE**

**INSEGNAMENTI DEL TRIENNIO DI  
STUDI PROPEDEUTICI**

## Insegnamenti Fondamentali

### 1. ISTITUZIONI DI MATEMATICHE (1° CORSO) (F12001)

PROF. ALBERTO ALESINA

Crediti Didattici totali:9

I corsi di Istituzioni di Matematiche si propongono di

- fornire allo studente le nozioni matematiche di più frequente utilizzo nella ricerca chimica;
- favorire la capacità di astrazione matematica dello studente, rendendolo in grado di individuare analogie tra i modelli matematici che incontrerà nelle diverse discipline.

Lo studente che inizia il corso deve conoscere le principali nozioni di Algebra, Geometria Analitica e Trigonometria. Non è invece indispensabile avere seguito in precedenza corsi di Analisi Matematica. Chi desidera verificare la propria preparazione può utilizzare il testo di P. Boieri e G. Chiti indicato in bibliografia.

Durante il corso verranno introdotti sia dal punto di vista teorico, sia tramite esempi e applicazioni, i seguenti argomenti:

- Insiemi e calcolo combinatorio, numeri reali.
- Limiti di successioni e limiti di funzioni.
- Serie numeriche.
- Derivate, grafici di funzioni, sviluppi di Taylor.
- Primitive, integrali definiti e impropri, funzioni integrali, confronti tra integrali e serie.
- Cenni agli integrali multipli.
- Primi elementi di equazioni differenziali ordinarie.

*Testo*

M. Bertsch, *Istituzioni di Matematiche*, Boringhieri.

*Altri testi*

B. Demidovic, *Esercizi e problemi di Analisi Matematica*, Editori Riuniti.

P. Boieri e G. Chiti, *Precorso di Matematica*, Zanichelli.

### 2A. CHIMICA GENERALE ED INORGANICA (F12002)

PROF. MICHELE ROSSI

Crediti Didattici totali: 9 (sei per la parte generale e tre per la chimica inorganica)

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.

*Chimica generale (6 crediti)*

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 della fase e diagrammi di stato.

#### *Chimica Inorganica ( 3 crediti)*

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*.

## **2B. LABORATORIO DI CHIMICA GENERALE E INORGANICA A e B (F12002)**

PROFF. GUIDO BANDITELLI E MADDALENA PIZZOTTI

Crediti Didattici totali: 6

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 DH, DS, e DG.

#### *Equilibrio chimico*

Principi generali: relazioni termodinamiche. Influenza delle variabili esterne. Equilibri eterogenei.

#### *Equilibri ionici in soluzione acquosa*

Calcolo di pH in sistemi monoprotici, poliprotici e in miscele.

#### *Equilibrio acido-base*

Calcolo di pH in sistemi monoprotici, poliprotici e in miscele.

#### *Equilibri eterogenei in soluzione*

Solubilità e prodotto di solubilità. Partecipazione e dissoluzione. Equilibri multipli in presenza di specie poco solubili. Costanti di formazione e dissociazione di ioni di ioni complessi.

#### *Elettrochimica*

Leggi di Farady. 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 Schaumann, Ed. Etas Libri.

### **3A. CHIMICA ANALITICA (F12003)**

PROF. ANTONIO ARANEO

Crediti Didattici totali: 9

#### *Programma di Chimica analitica qualitativa*

1) Generalità sull'analisi qualitativa. 2) Le soluzioni. 3) La solubilità dei composti. 4) Acidi e basi. 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) Reazioni degli elementi del gruppo analitico dell'alluminio. 14) Le reazioni di ossidoriduzione. 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*

1) Generalità sull'analisi quantitativa. 2) L'analisi gravimetrica. 3) Acidimetria e alcalimetria. 4) Le curve di titolazione. 5) Ossidimetria. 6) Permanganatometria. 7) Iodometria. 8) Bicromatometria. 9) Precipitimetria. 10) Complessometria. 11) Le curve di titolazione complessometriche. 12) Indicatori metallocromici. 13) Esercitazioni numeriche.

#### *Testi:*

A. Araneo, Chimica Analitica Qualitativa, CEA Milano.

A. Araneo, Chimica Analitica Quantitativa, PICCIN Padova.

### **3B. LABORATORIO DI CHIMICA ANALITICA A (F12003)**

DR.SSA LIVIA PELLICCIARI

Crediti Didattici totali: 6

Il laboratorio di chimica analitica comprende 20 esercitazioni di analisi qualitativa e 5 esercitazioni di analisi quantitativa. Le esercitazioni durano circa 4 ore ciascuna.

#### *Programma delle esercitazioni di analisi qualitativa (20 esercitazioni)*

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, argento nitrati e nitriti. 9) Solfati, solfuri, tiosolfati. 10) Analisi completa.

#### *Programma delle esercitazioni di analisi quantitativa (5 esercitazioni)*

1) Analisi acidimetrica. 2) Analisi alcalimetrica. 3) Analisi permanganato metrica. 4) Analisi precipitometrica. 5) Analisi complessometrica.

### **4. FISICA GENERALE (1° corso) (F12004)**

PROF. GIORGIO SPINOLO

Crediti Didattici totali: 9

#### *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.

#### *Terminologia*

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. Ambrosiana, Milano, M. Alonso, E.J. Finn, Addison-Wesley, Elementi di fisica, Ed. Bilingue.

### **5. ISTITUZIONI DI MATEMATICHE (2° corso) (F12005)**

PROF. GIANCARLO TRAVAGLINI

Crediti Didattici totali: 9

Lo studente che inizia il corso deve avere compreso i principali argomenti del corso precedente. L'esame de II corso non può essere sostenuto prima di quello del I corso.

Durante il corso verranno introdotti, sia dal punto di vista teorico, sia tramite esempi e applicazioni, i seguenti argomenti:

#### *Spazi vettoriali*

Distanza, spazio vettoriale  $\mathbb{R}^n$ , dipendenza lineare, basi, prodotto interno, basi ortonormali, spazi vettoriali astratti

#### *Numeri complessi*

Definizione di  $\mathbb{C}$ , operazioni e loro significato geometrico, scrittura algebrica, e trigonometrica di un numero complesso; serie esponenziale, identità di Eulero e scrittura esponenziale di un numero complesso; radici complesse di equazioni algebriche

#### *Serie di Fourier*

Serie di Fourier e coefficienti di Fourier, completezza del sistema trigonometrico, risultati sulla convergenza puntuale del sistema di Fourier

#### *Trasformazioni lineari e Matrici*

Matrici e trasformazioni lineari da  $\mathbb{R}^n$  in  $\mathbb{R}^m$ , prodotto di matrici, invertibilità di matrici, determinante, calcolo di matrici inverse

#### *Sistemi lineari e matrici*

Rango, teorema di Rouchè-Capelli, teorema di Cramer, sistemi omogenei, metodo di riduzione

#### *Particolari classi di matrici, autovettori ed autovalori*

Matrici simmetriche ed hermitiane, definizione di gruppo, gruppi ortogonali e unitari, il problema della diagonalizzazione di una matrice, autovalori ed autovettori, diagonalizzazione di matrici simmetriche ed hermitiane, matrici simmetriche definite positive

#### *Calcolo differenziale in $\mathbb{R}^n$*

Funzioni da  $\mathbb{R}^n$  in  $\mathbb{R}$ , derivate parziali, continuità, differenziabilità e gradiente, studio di massimi e minimi, derivate e differenziali successivi, metodo di Fourier per la risoluzione di equazioni differenziali alle derivate parziali, polinomi di Taylor, matrice hessiana, studio di massimi e minimi, funzioni da  $\mathbb{R}^n$  in  $\mathbb{R}^m$ , differenziazione di funzioni composte

#### *Calcolo integrale in $\mathbb{R}^n$*

Cambi di variabili per integrali multipli, matrice jacobiana, coordinate polari, cilindriche e sferiche; l'integrale gaussiano; curve e integrali curvilinei; integrazione di forme differenziali; forme differenziali esatte; teorema delle funzioni implicite; forme differenziali ed equazioni differenziali

L'esame di Istituzioni di Matematiche (2° corso) richiede il superamento di una prova scritta e di una prova orale. La prova scritta comprende vari esercizi, alcuni dei quali simili a quelli assegnati durante le lezioni. La prova orale consiste nella discussione degli esercizi assegnati a lezione, disponibili presso la Segreteria Didattica Chimica o in Internet (<http://www.mat.unimi.it/~travagli/chimicaindustriale.htm>); durante questa discussione lo studente dovrà mostrare di avere compreso le tecniche necessarie. All'indirizzo precedente saranno via via disponibili anche i testi delle prove scritte.

#### Bibliografia consigliata:

M. Bertsch, Istituzioni di matematiche, Boringhieri  
M. Vignati e A. Squellati, Appunti di algebra lineare, Datanova  
G. Stephenson, An introduction to matrices, sets and groups for science students, Dover  
S. Abeasis, *Elementi di algebra lineare e geometria*, Zanichelli.  
S. Abeasis, *Complementi di algebra lineare e geometria*, Zanichelli.  
B. Demidovic, *Esercizi e problemi di Analisi Matematica*, Editori Riuniti.  
G. Monti, A. Peretti e R. Pini, *Esercizi di matematica*, LED- Casa Editrice Ambrosiana  
E. Prestini, *Applicazioni dell'analisi armonica*, Hoepli  
E. Giusti, *Analisi matematica 2*, Boringhieri  
A. Bacciotti e F. Ricci, *lezioni di analisi matematica 2*, Levrotto & Bella  
G. Birkoff e S. Mac Lane, *Algebra*, Mursia  
F. Banino, *geometria per fisici*, Feltrinelli

#### **6A. FISICA GENERALE (2° corso) (F12006)**

PROF.SSA LINA ZUFFI

Crediti Didattici totali: 9

#### **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 in 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 Kirchoff.  
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 le sue applicazioni.  
Magnetici 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. Definizione 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 e capacità, resistenza induttanza e capacità.  
Impedenza e reattanza.  
Oscillazioni 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 termoelettrico. 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.  
Angolo 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. Analdi, R. Bizzari, 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.  
D. Halliday, R. Resnick, K.S. Krane, "Fisica", volume 2°, 4ª edizione – Casa Editrice Ambrosiana.

### **6B. LABORATORIO DI FISICA GENERALE (F12006)**

PROF.SSA ELENA MERONI

Crediti Didattici totali: 6

Il corso si articola in un ciclo di lezioni sulla teoria degli errori e su concetti ed elementi di fisica necessari per la comprensione e il corretto svolgimento delle prove di laboratorio, ed in una successiva serie di esercitazioni di laboratorio, in cui gli studenti svolgono semplici esperimenti di meccanica, elettromagnetismo e ottica.

#### *Analisi degli errori:*

Le misure sperimentali, errori: errore sistematico, errore casuale. Presentazione dei risultati e utilizzazione degli errori: numero di cifre significative, errore relativo.

I dati: distribuzioni discrete, continue, istogrammi; frequenze relative, normalizzazione.

Valor medio, valore più probabile, mediana, varianza.

Miglior stima del valor medio e della deviazione standard; errore sul valor medio.

Propagazione degli errori: errore probabile ed errore massimo possibile, propagazione degli errori di variabili indipendenti e no. Covarianza.

Distribuzione binomiale, applicazioni e proprietà, valor medio e deviazione standard, verifica di ipotesi.

Distribuzione di Gauss, applicazioni e proprietà, valor medio e deviazione standard; livelli di confidenza; integrale della distribuzione; giustificazione della media come miglior stima: principio di massima verosimiglianza; approssimazione gaussiana della distribuzione binomiale, modello binomiale per l'errore casuale.

Distribuzione di Poisson, applicazioni e proprietà, valor medio e deviazione standard; approssimazione gaussiana.

Rigetto dei dati, criterio di Chauvenet.

Combinazione di risultati di esperimenti diversi: compatibilità, media pesata: giustificazione con minimo errore e

massima verosimiglianza.

Metodo dei minimi quadrati: accordo fra dati e una retta o altre funzioni. Coefficiente di correlazione lineare. Il test del  $X^2$  per una distribuzione.  $X^2$  ridotto e gradi di libertà, livello di confidenza per l'accordo fra dati e la distribuzione attesa. Teoria della verifica delle ipotesi. Verifica di ipotesi sulla media di una variabile casuale normale, confronto fra le varianze e fra le medie di due variabili casuali normali.

*Meccanica dei fluidi:*

Dinamica dei fluidi viscosi. Metodi di misura della viscosità.

*Calorimetria:*

Calore e sua trasmissione. Misure del calore specifico di solidi.

*Correnti continue:*

Leggi di Kirchoff delle maglie e dei nodi. Misure di intensità di corrente: galvanometro. Principi di funzionamento dei galvanometrico a bobina mobile: taratura di un galvanometro di Deprez d'Arsonval.

Misure di capacità: leggi di scarica e carica dei condensatori. Taratura di un galvanometro balistico e misura della scarica e carica di un condensatore mediante galvanometro balistico.

*Elettrolisi:*

Leggi di Faraday. Voltmetro. Misure di conducibilità elettrica di un liquido.

*Correnti alternate:*

Circuiti RC.

*Ottica:*

Ottica geometrica: metodi di misura dell'indice di rifrazione di un mezzo. Proprietà delle lenti sottili. Metodi per la misura della distanza focale di una lente convergente o divergente.

Interferenza e diffrazione. Laser e lampade ad incandescenza.

*Elenco delle esperienze di laboratorio:*

Calorimetro - Misure di viscosità - Voltmetro - Conducibilità di un liquido Galvanometro - Galvanometro Balistico - Circuiti a corrente alternata - Lenti sottili: focometria - Prisma di dispersione - Misure di interferenza e diffrazione - Reticolo di diffrazione.

## **7. CALCOLO NUMERICO E PROGRAMMAZIONE (F12007)**

PROF. FRANCO CAZZANIGA

Crediti Didattici totali: 9

Il programma consta di tre parti distinte, ma interdipendenti fra di loro.

*1) Laboratorio di Calcolo*

Cenni di programmazione strutturata in FORTRAIN. 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 autovettori. 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 sulle 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.

## **8A. CHIMICA ORGANICA (1° corso)**

PROF. MAURO CINQUINI

Crediti Didattici totali: 9 ( 3 per la parte generale e 6 per la sintesi e la reattività dei gruppi funzionali)

### 1. Principi generali - Idrocarburi

*Orbitali* Atomici e orbitali molecolari. Legami covalenti. Ibridazione sp<sup>3</sup>. sp<sup>2</sup> e sp degli orbitali del carbonio (riepilogo dei concetti già noti).

#### *Alcani*

Il concetto di omologia. Nomenclatura IUPAC. Nomi di uso. Proprietà fisiche.

*Analisi conformazionale*

#### *Stereoisomeria*

Enantiomeria 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.

#### *Alcheni*

Nomenclatura. Isomeria geometrica e sua determinazione. Regole di sequenza e notazione configurazionali (isomeri Z e E).

#### *Aleni (dieni cumulati)*

#### *Dieni coniugati*

Il concetto di risonanza. Regole e considerazioni sulla risonanza. Determinazione sperimentale dell'energia di risonanza.

#### *Alchini*

Nomenclatura. Acidità.

#### *Idrocarburi aromatici*

Confronto con le proprietà chimiche degli alcheni. Il concetto di aromaticità.

#### *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.

#### *Intermedi di reazione*

Ioni carbonio, carbanioni, carbeni, radicali.

#### *Trasmissione intramolecolare di cariche elettriche*

Effetti induttivi e coniugativi. Iperconiugazione.

#### *Reattività chimica degli alcani*

Ossidazione: sintesi di idroperossidi. Alogenazione: meccanismo, reattività di alcani primari, secondari e terziari.

Nitrazione e solfonazione.

#### *Sintesi degli alcani*

Idrogenazione di olefine; riduzione di alogenuri alchilici e di composti carbonilici, sintesi di Wurtz e di Corey-House.

#### *Reattività degli alcheni*

Idrogenazione catalitica.

Addizioni elettrofile: meccanismo, stereochimica e orientazione, regola di Markownikoff; trasposizioni. Addizioni di  $\text{Al}_2$ ,  $\text{HAl}$ ,  $\text{H}_2\text{SO}_4$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ .

Alogenazione alilica. Idroborazione. Ozonizzazione, ossidrilazione, e epossidazione di alcheni. Ciclopropanazione.

#### *Sintesi degli alcheni*

Deidroalogenazione e dealogenazione di alogeno alcani; disidratazione; 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 alchini.

#### *Reattività chimica degli alchini*

Reattività verso reattivi elettrofili, nucleofili e radicalici; acidità; idrogenazione catalitica; idrogenazione selettive (cat. di Lindlar,  $\text{Na}$  e  $\text{NH}_3$  liq.) e loro aspetto stereochimico, addizione di alogeni, idracidi alogenici, acqua, alcoli e mercaptani, borani. Isomerizzazione.

#### *Sintesi degli alchini*

Dealogenazione di alogenuri alchilici e di alogenoetileni; alchilazione di 1-alchini.

#### *Dieni coniugati*

Sintesi. Proprietà chimiche: 1, 2- e 1, 4 addizioni, 1, 4- cicloaddizioni (sintesi dieniche e loro stereochimica).

#### *Aleni*

Sintesi, interconversione ad acetileni.

## *II. Derivati funzionali degli idrocarburi alifatici*

#### *Alogeno-derivati*

Reazioni di sostituzione nucleofila alifatica e di eliminazione. Meccanismi  $\text{S}_{\text{N}}2$ ,  $\text{S}_{\text{N}}1$ . Stereochimica. Effetti strutturali e del solvente. Eteri corona e criptanti (cenni). Catalisi per trasferimento di fase. Trasposizioni. Partecipazione del gruppo vicino.

Meccanismi  $\text{E}_1$ ,  $\text{E}_2$ ,  $\text{E}_{1\text{CB}}$ . Orientamento e reattività (regole di Saytzeff e di Hoffmann). Stereochimica. Confronto eliminazione-sostituzione. Eliminazioni intramolecolari.

Sintesi: alogenazione di alcani, alcheni e alcoli; scambio di alogeni (r. di Finkelstein).

#### *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.

Sintesi e reattività di cuprati.

#### *Alcoli*

Proprietà chimiche: acidità e basicità; formazione di eteri (r. di Williamson); estereificazione, 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 idroborazione di alcheni, idrogenazione catalitica e riduzione con idruri metallici dei derivati carbonilici; idrolisi di esteri; glicoli da alcheni; condensazione aldolica; sintesi di Reformatsky.

#### *Eteri*

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).

#### *Aldeidi e chetoni*

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; addizione di acqua, addizione di alcoli, glicoli e tioli; addizione di acido cianidrico, addizione di bisolfito; addizione di ammoniaca, 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; -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; scissione ossidativa dei glicoli; ozonolisi di olefine riduzione di cloruri acilici, riduzione di nitrili e di amidi.

Sintesi dei chetoni: ossidazione e deidrogenazione di alcoli secondari, ozonolisi di olefine; scissione di  $\beta$ -cheto-esteri; reazione dei reattivi di Grignard con i nitrili; reazione di cadmio-alchili con i cloruri acilici; trasposizione pinacolinica di 1,2-glicoli; idratazione di alchini.

#### *Acidi carbossilici*

Proprietà chimiche: acidità e basicità; conversione ed esteri, cloruri, ammidi anidridi; riduzione ed alcoli; a-alogenazione (r. di Hell-Vollhard-Zelinsky), decarbossilazione.

Sintesi: idrolisi di nitrili, esteri, cloruri acilici e ammidi, carbonatazione di derivati organo-metallici, sintesi acetacetica e malonica, ossidazione di alcoli aldeidi e alcheni; r. aloformio; r. di Bayer-Williger.

#### *Alogenuri acilici, anidridi e ammidi*

Sintesi e proprietà.

#### *Esteri*

Proprietà chimiche: idrolisi acida e alcalina, transesterificazione, reazione con derivati organo-metallici, riduzione, condensazione di Claisen e Dieckman.

Sintesi: da acidi carbossilici e alcoli, dai cloruri e dalle anidridi degli acidi, per transesterificazione.

#### *Ammine*

Proprietà chimiche: basicità e acidità; alchilazione, acilazione; reazioni con acido nitroso; ossidazione (N-ossidi); basi di Mannich; eliminazioni da composti quaternari (elim. di Hofmann e di Cope).

Sintesi: sintesi di Gabriel; riduzione di nitrocomposti, ossime, nitrili, ammidi ecc.; amminazione riduttiva di derivati carbonilici; demolizione di Hofmann, Curtius; trasposizione di Bekmann delle ossime.

#### *Immine, enammine*

Sintesi e proprietà.

#### *Nitro-composti*

Proprietà chimiche. Sintesi. Tautomeria.

#### *Ossime*

Sintesi e proprietà.

#### *Nitrili*

Sintesi e proprietà.

#### *Testi consigliati e di consultazione*

K P.C. Vollhardt Chimica Organica, Ed. Zanichelli, Bologna, 1997.

S. Ege, Chimica Organica, Ed. Sorbona, Milano 1994.

A. Streitwieser et al., Chimica Organica, EdiSES, 1995.

## **8B. LABORATORIO DI CHIMICA ORGANICA (1° corso) A e B (F12008)**

Crediti Didattici totali: 6

### Lezioni teoriche

#### *A Principi generali*

- 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.

#### *B Cenni a particolari classi di composti naturali*

- 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.
- Carboidrati: Monosaccaridi: classificazione, nomenclatura, rappresentazioni steriche, struttura e proprietà. Oligo- e polisaccaridi: principali strutture.
- Grassi - saponi. Generalità dei grassi naturali, grassi alimentari. Saponi e detergenti sintetici.
- Terpeni: Classificazione. Monoterpeni. Olii essenziali. Triterpeni. Steroidi naturali. Gomme naturali.

### 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, estrazione acido-base, 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, esterificazione).

#### *Testi consigliati*

D. Pasto, C. Johnson, M. Miller, Experiments and Techniques in Organic Chemistry, Prentice Hall, 1992.  
J.S. Nimitz, Experiments in Organic Chemistry, Prentice Hall, 1991.  
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.

## **9. CHIMICA FISICA (1° corso) (F12009)**

PROF. GIORGIO FIORI

Crediti Didattici totali: 9

### *Principi e applicazioni della teoria quantistica*

Origini della teoria quantistica. Equazione di Schrodinger. Principi quantomeccanici. Moto traslatorio. Moto vibrazionale. Moto rotazionale.

### *Struttura atomica e molecolare*

Struttura degli atomi idrogenoidi. Struttura degli atomi polielettronici. Gli spettri degli atomi complessi. Teoria del legame di valenza. Teoria dell'orbitale molecolare. Orbitali molecolari per sistemi poliatomici. Classificazione della

simmetria delle molecole.

#### *Spettroscopia molecolare*

Caratteristiche generali. Spettri rotazionali. Vibrazioni delle molecole biatomiche. Vibrazioni delle molecole poliatomiche. Transizioni elettroniche. Stati elettronicamente eccitati. Spettroscopia fotoelettronica.

#### *Tecniche di diffrazione*

Strutture cristalline. Diffrazione dei raggi X. Diffrazione di neutroni e elettroni.

#### *Proprietà elettriche e magnetiche delle molecole*

Momenti dipolari. Indice di rifrazione. Forze intermolecolari. Momento magnetico permanente. Momenti magnetici indotti.

#### *Testo consigliato*

P.W. Atkins. Physical Chemistry. Oxford University Press. V Edizione; Oxford 1994.

### **10A. CHIMICA ANALITICA STRUMENTALE (F12010)**

PROF. MICHELE GULLOTTI

Crediti Didattici totali: 9

#### *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 Volammetria ciclica: Introduzione e basi teoriche. Metodi polarografici quali e quantitativi. Strumentazione.

#### *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. Legge di Lambert-Beer. Effetto della struttura sull'assorbimento. Regole di selezione. Intensità delle transizioni elettroniche. Studio di cromofori. Applicazioni spettrofotometriche. Strumentazione. Analisi quantitativa.
- c) Spettroscopia di chemiluminescenza: Fluorescenza e Fosforescenza: Teoria. Strumentazione. Applicazioni.
- d) 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 di spettri infrarossi e Raman.
- e) Spettroscopia di Risonanza Magnetica Nucleare (NMR): Proprietà magnetiche dei nuclei. Interpretazione classica e quantomeccanica della risonanza magnetica nucleare. Strumentazione. Spostamento chimico. Accoppiamento spin-spin. Dipendenza dal tempo dei fenomeni NMR. Applicazioni analitiche. Interpretazione degli spettri NMR di molecole organiche. Spettroscopia NMR bidimensionale, tridimensionale e in stato solido. Tomografia NMR (*Imaging*). Altre applicazioni.
- f) Spettroscopia di Risonanza di Spin Elettronico (ESR): Introduzione. Condizioni di risonanza. Equilibrio termico e rilassamento di spin. Strumentazione. Applicazioni analitiche.
- g) Spettroscopia Fotoelettronica: Teoria e fondamenti. Strumentazione. Spettri fotoelettronici.
- h) Polarimetria e Spettropolarimetria: Teoria e fondamenti. Strumentazione. Metodi di analisi.

#### *Spettrometria*

Introduzione. Aspetti teorici. Il principio fisico del metodo. Strumentazione. Relazione tra struttura molecolare e frammentazione. Applicazioni analitiche. Interpretazione di spettri di massa.

#### *Cromatografia*

Classificazione 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.
- c) Gas-Cromatografia: Introduzione. Aspetti di equilibrio e meccanicistici. Termodinamica e cinetica della gas-cromatografia. Strumentazione. Rivelatori. Analisi quali e quantitative.

*Testi consigliati*

Skoog/Leary, Chimica Analitica Strumentale, Edises, Napoli.

H.H. Bauer, G.D. Christian, J.E. O'Reilly, Analisi strumentale, Ed. Piccin.

R. Ugo, Analisi chimica Strumentale, Ed. CEA.

H.H. Willard, L.L. Merritt, J.A. Dean, F.A. Settle Jr., Instrumental Methods of Analysis, International Thomson Organization.

H.A. Strobel, W.R. Heineman, Chemical Instrumentation: A Systematic Approach, Ed. John Wiley & Sons, New York.

## **10B. LABORATORIO DI CHIMICA ANALITICA STRUMENTALE A (F12010)**

Crediti Didattici totali: 6

*Metodologie Elettroanalitiche*

1. Potenzimetria:

1.1. pH-metria:

1.1.1. Taratura elettrodo a vetro-strumento

1.1.2. Titolazione acido-base di una miscela acido forte + acido debole con una base forte

1.1.3. Riconoscimento di un amminoacido mediante titolazione acido-base

1.2. potenzimetria redox: titolazione potenziometrica di ossidoriduzione

1.3. Potenzimetria per precipitazione: titolazione argentimetrica

1.4. Elettrodi iono-selettivi (ISE): analisi per potenziometria diretta

2. Conduttimetria:

2.1. Determinazione della costante di cella

2.2. Determinazione della conducibilità specifica di acque naturali

2.3. Titolazione conduttimetrica di una miscela acido + acido debole con base forte

3. Polarografia e voltammetria ciclica:

3.1. Differential Pulse Polarography: determinazione quantitativa di  $Pb^{2+}$  e  $Ni^{2+}$  in soluzione mista

3.2. Voltammetria ciclica: determinazione quantitativa di chinone in soluzione acquosa su elettrodo di Pt

*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.

## **11. CHIMICA BIOLOGICA (F12011)**



DR.SSA RENATA ZIPPEL  
Crediti Didattici totali: 9

#### *Introduzione*

Scopo e campi di studi della biochimica. La cellula come unità fondamentale dei processi chimici negli organismi viventi. Bioelementi e biomolecole. Ruolo dell'acqua nei processi biologici.

#### *Aspetti termodinamici dei processi biologici*

Energia libera, entropia ed entalpia. I fosfo-composti ad alto contenuto energetico. ATP ed composti ad alto potenziale di trasferimento di gruppo.

#### *Proteine*

Livelli di organizzazione strutturale delle proteine; struttura primaria, secondaria terziaria e quaternaria. Fattori determinanti la struttura secondaria e terziaria delle proteine. Evoluzione e funzione delle proteine. Alcuni esempi di proteine: proteine fibrose, collagene, mioglobina, emoglobina. Metodiche per la separazione delle proteine, per il sequenziamento di peptidi.

#### *Membrane biologiche*

Lipidi di membrana, struttura e funzione della membrana. Cenni sul trasporto di membrana.

#### *Enzimi.*

Struttura e classificazione degli enzimi. Coenzimi e cofattori. Cinetica enzimatica. Inibizione enzimatica. Regolazione dell'attività enzimatica: allosteria e modificazioni covalenti. Esempi di proteine catalitiche: serinproteasi ( chimotripsina), triosofosfatisomerasi. I ribozimi.

#### *Metabolismo*

Aspetti generali e metodi di studio

#### *Metabolismo dei carboidrati*

Glicolisi e fermentazione alcolica. Regolazione della glicolisi. Processi ossidativi: ossidazione del piruvato, ciclo dell'acido citrico, vie anaplerotiche, ciclo del gliossalato. Metabolismo dei pentosi fosfati. Gluconeogenesi. Sintesi e degradazione del glicogeno. Cicli futili. Regolazione ormonale della glicolisi e 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. Cenni sul metabolismo dei fosfolipidi.

#### *Metabolismo degli amminoacidi*

Deaminazione degli amminoacidi e ciclo dell'urea.

#### *Integrazione e controllo dei processi metabolici*

Regolazione ormonale del metabolismo energetico, risposte agli stress metabolici.

#### *Acidi nucleici*

Struttura dei diversi tipi di DNA e livelli di organizzazione strutturale, stabilità della struttura. I diversi tipi di RNA. Metodiche per il sequenziamento del DNA.

*Flusso dell'informazione*

Processi di replicazione del DNA. Processi di trascrizione: sintesi dell'RNA messaggero. Sintesi dell'rRNA e tRNA.

*Sintesi delle proteine*

Il codice genetico. Il processo di traduzione: accoppiamento dei tRNA agli amminoacidi, reazione di inizio, di allungamento e terminazione della traduzione.

*Regolazione dell'espressione genica*

L'operone del lattosio: regolazione negativa mediata dal repressore, regolazione positiva mediata dall'attivatore.

*Testi consigliati:*

Mathews, K.E. Van Holde, BIOCHIMICA. 1990 Casa editrice Ambrosiana. Milano. (o l'edizione originale inglese di tale testo)

Lehninger A. Nelson D.L. Cox M.M. PRINCIPI DI BIOCHIMICA, 1993 Zanichelli Bologna

D.Voet J.G.Voet BIOCHIMICA 1993 Zanichelli, Bologna.

**12A. CHIMICA FISICA (2° corso) (F12012)**

PROF. PAOLO CARNITI

Crediti Didattici totali: 9

*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 fase nei sistemi a un componente. Integrazioni 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 equilibri liquido-vapore della temperatura e della 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 delle 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 della temperatura e della pressione. Rapporto tra le costanti di equilibrio in fase gassosa e in soluzione.

#### *Terzo principio della termodinamica*

Formulazione del terzo principio. Verifiche e applicazioni.

#### *Risoluzione di problemi di termodinamica*

#### *Testi di consultazione*

K. Denbigh, I principi dell'equilibrio chimico, Casa Editrice Ambrosiana, Milano 1971; J.M. Prausnitz, R.N. Lichtenthaler, E. Gomesa de Azevedo, Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria, II ed., Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1986; R.C. Reid, J.M. Prausnitz, B.E. Poling, The Properties of Gases and Liquids, IV ed., McGraw-Hill, New York, 1988.

## **12B. LABORATORIO DI CHIMICA FISICA A e B (F12012)**

DR.SSA ELENA SELLI - PROF.SSA SANDRA RONDININI

Crediti Didattici totali: 6

Il corso tratta aspetti teorici e pratici di cinetica chimica, termodinamica ed elettrochimica, ed è suddiviso in lezioni e in esercitazioni di laboratorio. In particolare, le lezioni sono articolate in modo da fornire sia i fondamenti della cinetica chimica, sia una introduzione alla elettrochimica; le esercitazioni di laboratorio sono articolate in modo da realizzare esperimenti di termodinamica e di cinetica chimica ed elettrochimica.

#### **LEZIONI**

Velocità di reazione. Equazioni e costanti di velocità. Ordine di reazione e molecolarità. Equazioni cinetiche integrate di primo e di secondo ordine, di ordine zero, di ordine  $n$ . Grado di avanzamento della reazione. Tempo di

semitrasformazione (5 ore).

Determinazione dell'ordine di reazione. Reazioni parallele. Reazioni opposte. Reazioni consecutive. Approssimazione dello stato intermedio stazionario. Stadio determinante la velocità di reazione (5 ore)

Dipendenza della costante di velocità dalla temperatura. Equazione di Arrhenius: fattore pre-esponenziale ed energia di attivazione. Teoria delle collisioni. Teoria dello stato di transizione, equazione di Eyring. Entropia, entalpia ed energia libera di attivazione. Reazioni unimolecolari (5 ore).

Catalisi omogenea. Catalisi acido-basica. Cenni di catalisi enzimatica e di catalisi eterogenea (3 ore).

Introduzione all'elettrochimica. Forze elettromotrici di pila ed energie libere di reazione. Soluzioni elettrolitiche: attività e coefficienti di attività. Reazioni d'elettrodo: aspetti cinetici e fenomeni di trasporto di materia (10 ore).

Illustrazione delle esperienze di laboratorio (5 ore).

#### *ESPERIENZE DI LABORATORIO*

- I. Esperienze di cinetica chimica (32 ore)
- II. Determinazione sperimentale di grandezze termodinamiche (20 ore)
- III. Esperienze di cinetica elettrochimica (12 ore)

### **13A. CHIMICA ORGANICA (2° corso) (F12013)**

PROF. STEFANO MAIORANA

Crediti Didattici totali: 9

#### *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 benzenoidi*

1. Sostituzioni elettrofile
2. Sostituzioni nucleofile
3. Sostituzioni elettrofile e nucleofile sull'anello del naftalene
4. Sostituzioni radicaliche
5. Correlazioni quantitative tra struttura e reattività

#### *Areni*

1. Proprietà fisiche, fonti industriali
2. Metodi di ottenimento e comportamento chimico

#### *Alogeno derivati*

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 ariliazione
5. Riduzione

*Derivati aromatici con funzioni nitroso-, idrossilammino-, idrazo-, 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

*Derivati organici solforati. acidi arisolfonici, acidi solfonici, acidi solfenici, solfuri, solfossidi e solfoni, tiofenoli*

**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 di legame

*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. Piridina N-ossido, Diazine*

- Sintesi
- Reattività e selettività nei riguardi di reagenti elettrofilici e nucleofili
- Eventuale reattività specifica nei gruppi funzionali (metile, ammino, mercapto, ossidrile, alogeno, ecc.)

*Anelli eterociclici a 5 atomi contenenti un eteroatomo*

- Pirrolo e benzoderivati. Furano e benzoderivati
- Tiofene e tionaftene

*Anelli eterociclici contenenti due eteroatomi*

- Sintesi
- Reattività e selettività nei riguardi di reagenti elettrofilici e nucleofili
- Eventuale reattività specifica nei gruppi funzionali (metile, ammino, mercapto, ossidrile, alogeno, ecc.)

*Imidazolo, Pirazolo, Isossazolo, Tiazolo e benzotiazolo*

- Sintesi
- Reattività e selettività nei riguardi di reagenti elettrofilici e nucleofili
- Eventuale reattività specifica nei gruppi funzionali (metile, ammino, mercapto, ossidrile, alogeno, ecc.)

*Testi consigliati*

J. March, *Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure*, ed. McGraw-Hill Book Company; Katrizky, Lagowski, *Principi di Chimica Eterociclica*, ed. Ambrosiana, A. Liberles, *Introduction to Molecular-Orbital Theory*, ed. Holt, Rinehart and Winston, Inc.; K.P.V. Vollhardt, *Chimica Organica*, ed Zanichelli, Bologna 1990.

### **13B. LABORATORIO DI CHIMICA ORGANICA (2° corso) A e B (F12013)**

Crediti Didattici totali: 6

Il corso è semestrale e si articola in lezioni teoriche ed esercitazioni di laboratorio.

*Lezioni teoriche*

Verranno ripresi ed approfonditi concetti e reazioni trattati nel corso di Chimica Organica (2° corso), con particolare riguardo alle reazioni che saranno oggetto di esercitazioni di laboratorio.

L'impostazione del corso privilegerà gli aspetti sintetici della chimica dei composti aromatici ed eterociclici.

La scelta degli esperimenti e delle condizioni di reazione verrà fatta tenendo in considerazione i problemi di tossicità ed inquinamento correlati ai prodotti usati.

Nell'ambito del corso, alcune ore verranno dedicate all'approfondimento delle problematiche connesse alla sicurezza nei laboratori e sugli impianti chimici.

#### *Esercitazioni di laboratorio*

Esecuzione individuale di sintesi a uno stadio o a più stadi con caratterizzazione anche spettroscopica del prodotto finale:

- sintesi di un cloruro di un acido aromatico e suo impiego nella preparazione di un'ammide di interesse biologico (Autan)
- reazioni di sostituzione elettrofila aromatica (nitrazione, acilazione di Friedel-Crafts)
- reazioni dei sali di diazonio di ammine aromatiche: sintesi del metilarancio
- reazioni di sostituzione nucleofila aromatica
- catalisi in trasferimento di fase
- sintesi di composti eterociclici (sintesi indolica di Fischer)
- elementi di analisi organica qualitativa per via chimica e spettroscopica.

#### *Testi consigliati*

B.S.Firmiss, A.J. Hannaford, P.W.G. Smith, A.R.Tatchel, Vogel's Textbook of practical organic chemistry, Longman Scientifica and Technical, 1989

D.L. Pavia, G.M. Lampamann, G.S. Kriz: Il laboratorio di Chimica Organica; Edizioni Sorbona

### **14. CHIMICA FISICA INDUSTRIALE (F12014)**

PROF. LUCIO FORNI

Crediti Didattici totali: 9

#### a) Fenomeni di trasporto e applicazioni

##### *I fenomeni di trasporto (3 crediti)*

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 (2 crediti)*

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 (2 crediti)*

Diffusione, leggi di Fick. Equazioni di continuità. Diffusione stazionaria. Diffusione non stazionaria. Coefficienti di trasferimento di massa e loro determinazione.

Trasferimento simultaneo di massa e calore. Trasferimento di massa fra 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 (2 crediti)

Definizioni. Adsorbimento. Cinetica delle reazioni catalitiche. Preparazione e , caratterizzazione di un catalizzatore. Regimi di reazione e limitazioni diffusive. Reattori da laboratorio e loro accessori. Impianti pilota catalitici.

*Nota*

Le lezioni teoriche sono alternate ad esercitazioni numeriche. L'esame di profitto consiste in uno scritto, costituito da problemi inerenti agli argomenti trattati, seguito da un orale.

*Libri consigliati*

L. Forni, Fenomeni di trasporto, Cortina, Milano, 1994; L. Forni, Introduzione alla catalisi, Cusl, Milano, 1993; R.B. Bird, W.E. Steward, E.N. Lightfoot, Transport Phenomena, Wiley, London, 1960; C.O. Bennett, J.E. Meyers, Momentum, heat and mass transfer, McGraw-Hill, New York, 1962.

**15. CHIMICA INDUSTRIALE I (F12073)**

PROF. GIUSEPPE FAITA

Crediti Didattici totali: 9

1. La chimica industriale: elementi caratterizzanti di natura tecnica ed economica.
2. Sintesi di ammoniaca.  
Schemi a blocchi dei processi disponibili sul mercato.  
Analisi di un flowsheet quantificato del processo basato su steam-reforming di gas naturale.
3. Generatori di vapore. Struttura meccanica e trattamento delle acque di alimentazione.
4. Impianti per le acque di raffreddamento. Strutture e trattamenti antincrostanti e anticorrosione.
5. Produzione elettrolitica di cloro e soda. Processi disponibili sul mercato. Caratteristiche e tendenze.
6. Materiali di costruzione per gli impianti chimici. Schemi per una selezione ragionata.
7. Metodi di controllo non distruttivo nell'accettazione di nuove apparecchiature e nell'ispezione di impianti durante la manutenzione programmata.

**16. LABORATORIO DI CHIMICA INDUSTRIALE I (F12074)**

PROF. GIUSEPPE DI SILVESTRO

Crediti Didattici totali: 6

*Scopi del corso*

Alla fine del corso lo studente:

- a) dovrebbe essere in grado di analizzare criticamente i problemi connessi allo sviluppo ed alla sicurezza di reazioni e di processi industriali che coinvolgono trasformazioni chimiche e/o fisiche in base alla conoscenza del chimismo e della stabilità dei componenti coinvolti ed in relazione alle norme di legge legati alla sicurezza ambientale.
- b) Conoscere gli aspetti fondamentali dei principali processi industriali di produzione dei materiali polimerici.

*Programma del corso*

- a) Criteri generali e metodi inerenti con la stabilità dei prodotti e la sicurezza dei processi chimici. Metodi termici (DSC, TGA, ARC, ecc.) e loro applicazioni in campo chimico-organico e farmaceutico allo scopo di determinare ed usare criticamente il comportamento di sostanze pure ed in miscela mediante i relativi diagrammi di stato.
- b) Calorimetria di reazione. Applicazioni nello sviluppo di processi; determinazione dei parametri relativi alla sicurezza. Discussione di incidenti in processi produttivi.
- c) Sicurezza ambientale dal punto di vista delle norme di legge.
- d) Processi industriali di produzione di polimeri: aspetti fondamentali ed esempi importanti. Proprietà dei polimeri: metodi di misura e significato nei processi di trasformazione dei materiali polimerici.



## 17A. CHIMICA INORGANICA (F12017)

PROF. RENATO UGO

Crediti Didattici totali: 9

- 1) Correlazione tra struttura elettronica degli atomi secondo Slater, variazione dei livelli elettronici e proprietà degli elementi: la Tavola Periodica.  
Variazione periodica di energia di ionizzazione, affinità elettronica e infine dell'elettronegatività.  
I concetti di elettronegatività e di polarizzabilità.  
Binding energies e variazione delle energie di coesione e di legame nel sistema periodico.  
Distribuzione periodica di metalli, isolanti e semiconduttori, di non metalli a carattere molecolare. Caratteristiche periodiche dei legami elemento-idrogeno, elemento-alogeni e elemento-elemento.  
Caratteristiche periodiche dei metalli (elettropositivi, mediamente elettropositivi e infine nobili) e correlazione con elettronegatività dei metalli stessi.  
Periodicità nella preparazione degli elementi e nei processi metallurgici.
- 2) Le caratteristiche dei solventi e le teorie generali degli acidi e delle basi. Le caratteristiche e proprietà in acqua degli ossiacidi, superacidi e superbasi in solventi non acquosi. L'interazione acido-base di Lewis e i concetti di acceptor e donor numbers.  
Acidi e basi soft e hard, gli ioni metallici come centri acidi soft e hard; i solventi donatori come basi soft e hard.
- 3) I principi della chimica di coordinazione: numeri di coordinazione, natura del legame dativo, stereochimica, isomeria e chelazione.  
Le caratteristiche donatrici e accettrici dei leganti.  
Le costanti di stabilità e l'effetto chelante.  
Gli effetti della variazione della sfera di coordinazione sulle proprietà redox degli ioni metallici.  
Reazioni di sostituzione nei complessi esacoordinati e planari quadrati, l'effetto trans.  
I processi di electron-transfer all'interno e all'esterno della sfera di coordinazione. Processi flussionali dei leganti nella sfera di coordinazione.
- 4) La chimica dei metalli alcalini e alcalino-terrosi: aspetti generali e industriali.
- 5) La chimica degli elementi di post-transizione inclusi Boro, Alluminio e i Gas Nobili, aspetti generali e industriali.
- 6) La chimica dei lantanidi e dei transuranici: aspetti generali.
- 7) La chimica degli ossidi, degli idrossidi e degli ossiacidi e degli ossianioni.
- 8) La chimica degli idruri semplici.
- 9) Il legame elemento-elemento e i composti inorganici a catena, a cicli e a grappoli. Esempi di allotropia.
- 10) Cenni alla chimica dei metalli di transizione: caratteristiche metalliche, forze di coesione, potenziali di ionizzazione.  
I differenti comportamenti generali degli elementi del primo periodo di transizione rispetto al secondo e al terzo (stabilità; stato di ossidazione, proprietà redox, caratteristiche dei metalli).  
Il passaggio dagli elementi con pochi elettroni d (caratteristiche meno metalliche, comportamento hard degli ioni) agli elementi con molti elettroni d (caratteristiche metalliche, comportamento soft degli ioni).  
Alti, medi e bassi stati di ossidazione: caratteristiche dei leganti che stabilizzano le tre diverse classi e dei meccanismi elettronici di interazione legante-metallo.  
Cenni al campo dei leganti e alle proprietà ottiche e magnetiche. Proprietà redox degli elementi del primo periodo di transizione e loro variazione al variare dei leganti.  
Proprietà redox degli ossiacidi, ossianioni e degli ossidi.

### *Testi consigliati*

P. Chini "Complementi di Chimica Generale e Inorganica", Ed. Clued;

F.A. Cotton, G. Wilkinson, P.L. Gauss "Basic Inorganic Chemistry", 2nd Ed. J. Wiley.

## 17B. LABORATORIO DI CHIMICA INORGANICA A (F12017)

Crediti Didattici totali: 6

- 1) Il legame ionico. Strutture dei solidi ionici, energia reticolare, costanti di Madelung, correlazioni empiriche

- raggio/carica degli ioni e strutture.
- 2) Il legame covalente. Richiami di teoria MO-LCAO, orbitali localizzati (ibridazione), teoria VSEPR e strutture geometriche.
  - 3) Il legame chimico nei solidi. Solidi covalenti, isolanti, semiconduttori e metalli.
  - 4) Il legame di coordinazione. Strutture elettroniche dei metalli delle transizioni d. Configurazioni elettroniche e stati di valenza. Andamento dei potenziali di ionizzazione. Effetto del campo dei leganti; rimozione delle degenerazioni in campi ottaedrici, tetraedrici e piana quadrati. Struttura elettronica dei leganti; leganti puramente a donatori; leganti s-p. Forza del campo dei leganti. Complessi ad alto e basso spin. Proprietà magnetiche. Gli alogenuri come leganti leganti all'ossigeno, all'azoto. Fosfine e fosfine sostituite; leganti insaturi al carbonio: CO, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>. Esempi e strutture. I carbonili della prima serie di transizione: strutture e reattività.
  - 5) Richiami di elettrochimica: G, E, stati di riferimento. La serie elettronica. Stabilità degli stati di ossidazione. Pile ed elettrolizzatori. Aspetti cinetici.
  - 6) Esercitazioni di laboratorio. Preparazione, caratterizzazione e saggi di reattività di composti di coordinazione di Cr, Mu, Fe e Mo.

**17bis. PROVA DELLA CONOSCENZA DELLA LINGUA INGLESE  
(F12066)**

PROFF. FERRUTI, FIORI, GRASSI, MAZZA, PIZZOTTI, P. MUSSINI

Non si tratta di un corso ma di una prova pratica che si conclude, in caso positivo, con un giudizio (approvato) e non un voto.

Il superamento di questo esame è necessario per poter sostenere alla fine degli studi l'esame di laurea: infatti il Nuovo Ordinamento prevede che per laurearsi lo studente debba aver superato almeno 24 esami e la prova di conoscenza della Lingua Inglese.

**CORSO DI LAUREA IN CHIMICA INDUSTRIALE**

**INSEGNAMENTI DEL BIENNIO  
DI APPLICAZIONE**

## Corsi fondamentali

### 18A. CHIMICA INDUSTRIALE II (F12018)

PROF. DARIO LANDINI

Crediti Didattici totali: 9 (cinque per i capitoli da 1 a 9 e quattro per i capitoli da 10 a 18)

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. Vibreaking. 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 C1: 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, polietilenglicol, glicole carbonato.  
Dimetil carbonato. Acetaldeide: il processo Wacker-Hochst, acetaldeide da etanolo e da alcani. Acido acetico da acetaldeide e da metanolo. Anidride acetica
10. Etanolo. Isopropanolo. Butanoli. Alcoli superiori. Dioli e polioli. Alogeni, esteri ed eteri vinilici.
11. Intermedi per poliammidi. Ac. adipico esametildiammina. 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 ammoossidazione.
13. Sintesi industriali di ammino-acidi.
14. Idrocarburi clorurati.
15. Idrocarburi aromatici. Produzione da carbone e da petrolio. Processi di dealchilazione, isomerizzazione, disproporzionamento. Benzene. Toluene. Xileni. Naftalene. Antracene.
16. Derivati dal benzene. Etil benzene, stirene, cumene, alchil benzeni, cicloesano, fenolo anidride maleica, diisocianati.
17. Derivati degli xileni e del naftalene: anidride ftalica, esteri ftalici, ac. tereftalico.
18. Derivati dell'antracene: antrachinone. Produzione di H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>.

#### *Testi consigliati*

K. Weissmermel, H.I. Arpe, Industrial Organic Chemistry, 3rd. Ed., VHC, Weinheim, 1997;  
Id., Chimica Organica Industriale (Traduz. italiana della I ed., tedesca, e aggiornamento ricavato dalla 2a ed. tedesca a cura di C. Botteghi Piccin ed., Padova, 1981, 1991),  
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, La raffinazione del petrolio - Chimica e tecnologia - ESA-Masson, 1991; Petrolchimica, Ed. Scientifiche Siderea, Roma, 1985, III ed.,  
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.

## **18B. LABORATORIO DI CHIMICA INDUSTRIALE II (F12018)**

PROF.SSA RITA ANNUNZIATA

Crediti Didattici totali: 6

Spettroscopia di Risonanza Magnetica Nucleare e di Spettrometria di Massa: loro impiego pratico per il monitoraggio di processi e per l'analisi di reagenti e di prodotti.

Il corso sarà articolato in 2 parti.

### I parte. La spettroscopia di risonanza magnetica nucleare

#### *Principi base della spettroscopia di RMN*

Quantizzazione del momento angolare e sua correlazione col momento magnetico. Energia del nucleo in un campo magnetico e popolazione dei livelli energetici. La magnetizzazione macroscopica e le condizioni di risonanza.

#### *Tecniche sperimentali e strumentazione*

Descrizione classica dell'esperimento ad impulsi. Tempi di rilassamento. esperimento di RMN in trasformata di Fourier. Gli spettrometri FT RMN.

#### *Parametri spettrali*

Lo spostamento chimico. L'accoppiamento spin-spin. Analisi spettrale e calcolo dei sistemi di spin superiori al primo ordine. Simulazione dello spettro e iterazione.

#### *La RMN e la tavola periodica*

Applicazione della RMN a nuclei diversi dall'idrogeno. Parametri spettrali. Esperimenti di doppia risonanza. Correlazione tra costante d'accoppiamento X-H, spostamento chimico ((greco)x) e struttura chimica.

#### *Esperimenti monodimensionali (1D) con sequenze d'impulsi complesse*

SPIN ECHO, SPT, SPI, SEFT, INEPT, DEPT, INADEQUATE (1D). Effetto Overhauser (NOE). Spettroscopia dinamica (DNMR). Reagenti di spostamento.

#### *La spettroscopia bidimensionale (2D)*

L'esperimento NMR in due dimensioni. Spettroscopia di correlazione, J-Resolved e di scambio.

#### *Testi consigliati*

H. Friebolin, Basic one and two-dimensional NMR spectroscopy, VCH Publishers, New York; A.E. Derome, Modern NMR Techniques for Chemistry Research, Pergamon Press.

### II Parte. La spettrometria di massa

#### *Principi del metodo e strumentazione*

Sistemi d'introduzione del campione. Le sorgenti. Gli analizzatori. I rivelatori. Il sistema di vuoto. Il registratore. Risoluzione e sensibilità. L'impiego del calcolatore in spettrometri di massa: l'acquisizione dei dati e l'elaborazione degli spettri. Identificazione di spettri per mezzo di biblioteche di spettri di riferimento.

#### *Lo spettro di massa*

Lo ione molecolare e principali tipi di ioni. Informazioni deducibili da uno spettro di massa: picchi isotopici, massa molecolare.

#### *La frammentazione*

Fattori che influenzano la frammentazione degli ioni. Stabilità di uno ione. Tipi di frammenti. Frammentazioni a più centri.

#### *La frammentazione nelle principali classi di sostanze organiche*

Sistematica: idrocarburi, alcoli, fenoli, eteri, amine, aldeidi e chetoni, acidi e derivati.

*Testi consigliati:*

B. Gioia, R. Stradi, E. Rossi, Guida al corso di metodi fisici in chimica organica, Vol. II, Massa; Cusl, P.zza L. Da Vinci 32, Milano; F.W. McLafferty, Interpretation of Mass Spectra, 2<sup>a</sup> ed., Benjamin Eds., London.

Sia per la spettroscopia di RMN che per la spettrometria di massa sono previste esercitazioni pratiche volte all'interpretazione di spettri e alla soluzione di problemi strutturali.

**18bis-A. PROCESSI E IMPIANTI INDUSTRIALI CHIMICI I (F21016)**

PROF. VITTORIO RAGAINI

Crediti Didattici totali: 9

*Introduzione al corso*

Gli Impianti Chimici in generale. Impostazione del corso per i Chimici Industriali. Rapporto con corsi affini (Chimica Fisica, Industriale, Processi e Impianti Industriali Chimici II).

Il problema della reperibilità dei dati. Testi consigliati per il corso e per consultazione generale.

*Termodinamica applicata (crediti: 2,7)\**

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 blocchi 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; tielines. Correlazione per la determinazione delle rette coniugate (tielines) e del plant point.

*Assorbimento dei gas (crediti 2,25)\**

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 (crediti 2,25)\**

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 calore da fornire in caldaia e da sottrarre al 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 e riempimento. Distillazione estrattiva e azeotropica. Distillazione continua. Rettifica discontinua. Distillazione molecolare.

*Estrazione liquido-liquido (crediti 1,8)\**

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 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.

\* applicazioni numeriche incluse

### **18bis-B. LABORATORIO DI PROCESSI E IMPIANTI INDUSTRIALI CHIMICI A (F12016)**

Crediti Didattici totali: 6

#### *Termodinamica applicata (crediti 1,5)\**

Esperienze per ricavare dati di equilibrio liquido-vapore (ELV). valutazione della consistenza termodinamica di questi dati. Riproduzione dei dati di ELV con modelli differenti per quanto riguarda il calcolo dei coefficienti di attività.

#### *Assorbimento/Deassorbimento di gas (crediti 1,5)\**

Esperienze su colonna con diversi tipi di corpi di riempimento. Calcolo delle efficienze dei diversi tipi di riempimento. Perdite di carico della colonna con diversi riempimenti. Valutazione sperimentale delle condizioni di ingorgo.

*Distillazione e Rettifica (crediti 1,5)\** Esperienza su miscele binarie e ternarie su colonna a piatti, operanti in diverse condizioni, al fine di valutare l'influenza di vari parametri e situazioni (rapporto di riflusso, condizione termica dell'alimentazione, posizione dell'alimentazione). Bilanci termici sul condensatore di testa e sul ribollitore di coda. Valutazione dell'efficienza dei piatti.

#### *Estrazione liquido-liquido (ELL) (crediti 1,5)\**

Esperienze su estrattore a uno o a più stadi al fine di selezionare il solvente e le condizioni operative migliori per alcune estrazioni con solvente parzialmente o totalmente immiscibile. Interpretazione dei risultati con alcuni modelli per il calcolo dei coefficienti di attività.

\* Applicazioni numeriche incluse

### **19. PROCESSI E IMPIANTI INDUSTRIALI CHIMICI II (F12019)**

PROF. PAOLO BELTRAME

Crediti didattici totali: 9

#### *Cinetica applicata (crediti didattici parziali: 4)*

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 (crediti didattici parziali: 5)*

Schemi di processo. Simboli e sigle. Schemi di regolazione. Bilanci di massa e di energia.

Reattori discontinui. Reattori semicontinui. Reattori continui tubolari ideali.

Reattori continui a completo mescolamento. Conversione e selettività nei diversi reattori. Effetti termici. Reattori continui non-ideali. Distribuzione dei tempi di residenza nei reattori continui. Modelli di reattori continui a mescolamento parziale. Reattori per reazioni gas+liquido. Reattori trifasici. Reattori per reazioni gas+solido.

Reattori con catalizzatori monolitici.

Impianto pilota, impianto industriale: passaggi di scala. La sicurezza nei processi chimici.

#### *Testi consigliati*

O. Levenspiel, Chemical Reaction Engineering, Wiley, New York, 1972.

L.M. Rose, Chemical Reactor Design in Practice, Elsevier, Amsterdam, 1981.

## Corsi obbligatori e opzionali d'Indirizzo

### 20A. CHIMICA FISICA DEI MATERIALI (F12020)

PROF. CLAUDIO M. MARI

Crediti Didattici totali: 6

#### *La termodinamica dei processi irreversibili*

- a) Introduzione (equilibrio dinamico, campi di linearità dei processi di trasporto, il concetto dei componenti).
- b) La produzione di entropia nei processi irreversibili (produzione di entropia in un sistema adiabatico discontinuo, trasferimento di un solo calore nei solidi, trasferimento di calore e materia nei solidi, trasferimento di calore materia e cariche elettriche nei solidi, produzione di entropia in un sistema adiabatico continuo).
- c) Le equazioni di flusso (le equazioni di flusso e i coefficienti fenomenologici, le relazioni di Onsager e le equazioni di flusso approssimate per sistemi in stato stazionario).
- d) Applicazioni (processi di trasporti, effetto Soret e potere termoelettrico nei materiali).

#### *Diagrammi di fase*

- a) Introduzione (tipi di diagrammi di fase).
- b) Sistemi ad un componente.
- c) Sistemi a due componenti (soluzioni ideali, deviazioni dall'idealità, soluzioni sub-regolari, fasi intermedie).
- d) Sistemi a tre componenti.
- e) Sistemi ternari.

Con particolare riferimento a solidi (materiali metallici, semiconduttori e isolanti).

#### *Proprietà strutturali dei solidi*

- a) Stato cristallino e amorfo.
- b) Transizioni cristallino-gommosa-vetrosa (con riferimento ai fattori che le influenzano).
- c) Teoria delle dislocazioni (con riferimento a elasticità, plasticità e frattura).
- d) Comportamento dei materiali alle sollecitazioni statiche e dinamiche (rottura duttile e fragile).
- e) Comportamento alle sollecitazioni cicliche (resistenza a fatica).
- f) Trattamento matematico del comportamento viscoso-elastico.
- g) Trattamento termodinamico e statistico dell'elasticità della gomma.

### 20B. LABORATORIO DI CHIMICA FISICA DEI MATERIALI (F12020)

Crediti Didattici totali: 6

Il corso prevede lo svolgimento di esperienze di laboratorio nel campo della chimica fisica dei solidi. Le lezioni di laboratorio saranno precedute e integrate da lezioni in aula.

#### *Argomenti delle lezioni*

Richiami di struttura dei solidi. Richiami di termodinamica. I diagrammi di fase. Difetti nei solidi: analisi termodinamica. Impurezze nei solidi. Ionizzazione di difetti. Proprietà ottiche dei difetti. Fenomeni di trasporto in conduttori ionici ed elettronici. Metodi sperimentali in chimica fisica dello stato solido.

#### *Esperienze di laboratorio*

Si prevede lo svolgimento di un'unica esperienza articolata su 15 pomeriggi. Ogni gruppo (3-4 studenti) dovrà individuare, con il supporto del Docente, una strategia di ricerca atta a risolvere uno specifico quesito sul comportamento chimico-fisico di un materiale. Il gruppo dovrà pertanto occuparsi della preparazione, del trattamento e della caratterizzazione del materiale stesso. Le tecniche di caratterizzazione poste a disposizione degli studenti includono le spettroscopie FTIR, UV-vis e ESR, i metodi diffrattometrici e le tecniche di misura di conducibilità elettrica. Le esercitazioni sperimentali saranno eventualmente affiancate da un lavoro di ricerca bibliografica che gli studenti



svolgeranno presso la Biblioteca Chimica.

*Elenco delle esperienze*

1. Analisi dei difetti di punto in TiO<sub>2</sub>: struttura e dipendenza della concentrazione in condizioni di non-equilibrio.
2. Mobilità di difetti di punto in zirconia.
3. Drogaggio di ossidi di metalli di transizione.
4. Processi di trasporto elettronico in ZnO: ionizzazione delle vacanze.
5. Effetti di non-stechiometricità sulle proprietà di Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>.

Gli studenti presenteranno come prova scritta d'esame una tesina comprensiva della attività sperimentale svolta, delle conoscenze acquisite attraverso la letteratura consultata e delle conclusioni ottenute dall'analisi dei dati sperimentali.

## **21. CHIMICA ORGANICA INDUSTRIALE (F12021)**

PROF. DARIO LANDINI

Crediti Didattici totali: 6 (uno per la parte A, tre per la parte B, due per la parte C)

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 dell'industriale. Il contenuto del corso è una descrizione dettagliata dei principali processi organici (Processi unitari) che riguardano: nitrificazione, amminazione (per riduzione, ammonolisi 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.

Il corso comprende una parte A, introduttiva "Il processo chimico", una parte B più applicativa "Processi unitari", e una parte C "Analisi economica di un processo chimico".

### *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. Processi Unitari (P.U.)*

- 1) Aspetti generali di un P.U.
- 2) Nitrificazione: aspetti generali. Agenti nitranti industriali. Nitrificazione di idrocarburi aromatici: aspetti cinetici e termodinamici. Nitrificazione di paraffine in fase vapore e in fase liquido. Nitrazioni di alcoli, dioli e polioli, N-nitroderivati d'interesse industriale. Nitratatori industriali per processi continui e discontinui. Processi industriali di mono e polinitrazione di: benzene, toluene, clorobenzene, naftalene. Processi industriali di nitrificazione radicalica in fase vapore del propano: produzione e usi del nitrometano, nitroetano e nitropropani.
- 3) Amminazione.

- a) Amminazione riduttiva: aspetti generali. Riduzione di nitrocomposti organici con metalli (Fe, Sn, Zn) in ambiente acido e con H<sub>2</sub> e catalizzatori di idrogenazione: produzione industriale dell'anilina, parafenilendiammina, toluendiammina e 2-amminopolioli. Riduzioni di nitrocomposti organici con metalli in ambiente alcalino: produzioni industriali di idrossilammine azo- e idrazobenzeni. Riduzione selettiva di nitrocomposti organici con solfuri alcalini: produzione industriale di nitroammine, amminoazobenzeni.
- b) Amminazione per ammonolisi e amminolisi: aspetti generali. Agenti amminanti industriali. Cenni sulla cinetica e la termodinamica dell'amminolisi. Ammonolisi e amminolisi per sostituzione a addizione. Ammonolisi a amminolisi di alcoli. Idroammonolisi o amminazione riduttiva di alcoli, aldeidi, chetoni ed acidi carbossilici. Ammoossidazione di idrocarburi saturi ed insaturi. Reattori industriali di ammonolisi ed amminolisi. Esempi di processi industriali per la produzione di ammine aromatiche ed alifatiche.
- 4) Solfonazione e solfatazione: aspetti generali. Agenti solfonati e solfatanti industriali. Clorosolfonazione, solfoclorurazione, solfoossidazione. Solfonazione di olefine. Solfonazione di idrocarburi aromatici. Solfatazione di alcoli. Solfatazione e bisolfatazione di olefine e del legno. Solfonatori industriali per processi discontinui e continui. Solfonatori a film. Esempi di processi industriali per la produzione di acidi arilsolfonici (acido benzensolfonico, acido 1- e 2-naftalensolfonico), acidi alcan- alchen- e idrossialcansolfonici.

*C. "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 a 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 progetto.
- 12) Incertezza delle valutazioni economiche.

*Testi consigliati*

Faith, Industrial Chemistry, John Wiley, 1975; Kirk-Othmer, Encyclopedia of Chemical Technology, III, ed. 1981/82, IV ed. 1992; Mc Ketta, Encyclopedia of Chemical Processing and Design, M. Dekker, 1979; Ullmann's, Encyclopedia of Industrial Chemistry, VCH Verlagsgesellschaft MBH, 1996; G.F. Pregaglia: Analisi economica dei processi, Clued. Altro materiale fornito durante le lezioni.

**22A. CHIMICA DELLE FERMENTAZIONI E MICROBIOLOGIA INDUSTRIALE (F12022)**

**(mutuato da Chimica)**

PROF.SSA BIANCA MARIA RANZI

Crediti Didattici totali: 6

*Biologia dei microorganismi industriali*

Cenni di struttura e morfologia dei microrganismi industriali.  
 Gruppi microbici di interesse industriale.  
 Metabolismo microbico primario e secondario e sua regolazione.  
 Miglioramento genetico dei microrganismi di interesse industriale.  
 Conservazione dei ceppi industriali.

*Sistemi di fermentazione*

Batch, coltura continua, fed-batch.

Cellule ed enzimi immobilizzati.  
Bioreattore: monitoraggio, controllo.  
Separazione e purificazione dei prodotti ottenuti.

*Fermentazioni anaerobie: biosintesi e tecnologia*

Etanolo.  
Acido lattico.  
Acetone - butanolo.  
Acido propionico.  
Fermentazione acido mista.

*Fermentazioni aerobie: 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, tetraciclina.  
Biotrasformazioni.  
Produzione di biomasse.  
Produzione ed applicazione di biopolimeri.  
Prodotti da DNA ricombinante.

*Testi*

Stainer "Il mondo dei microrganismi" Zanichelli.  
Lehninger "Principi di Biochimica", Zanichelli.  
Doelle "Bacterial metabolism", Academic Press.  
Rainbow, Rose "Biochemistry of industrial microorganism", Academic Press.  
Cruegher "Biotechnology" Science Tech. Inc.  
Wiseman "Principles of biotechnology", Surrey Un. Press.  
Bu'Lock "Basic Biotechnology", Accad. Press.  
Murooke "Recombinant microbes for industrial and agricultural applications". Marcel Dekker Inc.

Il corso comprende anche esercitazioni su alcuni argomenti trattati.

**22B. LABORATORIO DI CHIMICA DELLE FERMENTAZIONI E  
MICROBIOLOGIA INDUSTRIALE (F12022)**

PROF.SSA BIANCA MARIA RANZI

Crediti didattici totali: 6

*Lezioni teoriche*

Cinetiche di crescita nei diversi sistemi di fermentazione.  
Produzione in fermentazione continua e discontinua.  
Tecnologie di fermentazione: sterilizzazione, aereazione, agitazione.  
Biopolimeri: produzione e applicazioni.

*Esercitazioni in laboratorio*

Microorganismi industriali: procarioti, eucarioti: morfologia e crescita.  
Isolamento, riconoscimento e caratterizzazione di una specie microbica.  
Cinetica di crescita di un microrganismo produttore.  
Ingegneria genetica per migliorare la produzione.  
Cinetica di produzione di un composto con un microrganismo selvatico e con un microrganismo ingegnerizzato.  
Produzione e riconoscimento di un antibiotico.  
Biotrasformazione.  
Fermentazione in fed-batch di un lievito ricombinante.  
Da impianto di laboratorio ad impianto su grande scala: la realtà industriale.

## 23A. ELETTROCHIMICA (F12023)

PROF. SERGIO TRASATTI

Crediti Didattici totali: 6

### *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 particella 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. 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  $f$ . Elettrodi di riferimento. Elettrodi di I e II specie. Catena galvanica aperta. Componenti di  $f$ . Significato del potenziale misurato. E come differenza di energia elettronica. E come differenza di  $G$  per la reazione di cella. Derivazione termodinamica di  $G = -nFE$ .

### *Trasformazioni reversibili*

Confronto fra sistema chimico e sistema elettrochimico. Sistema elettrochimico reversibile. Reazioni parziali e totali. Misura di  $G$ ,  $S$ ,  $E^\circ$  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. Diagramma di Parsons e Zobel. Isotherme di adsorbimento.

Test delle isoterme. 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 (greco). Significato di (greco). Resistenza di reazione. Retta di Tafel. Estrapolazione della corrente di scambio. Confronto con la resistenza di reazione. Sopratensione 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 (crono-coulometria).

Esercizi per la flessibilità coordinativa. Esempi di catalisi omogenea e di reattività dei complessi.

### **23B. LABORATORIO DI ELETTROCHIMICA (F12023)**

DR.SSA PATRIZIA MUSSINI

Crediti didattici totali: 6

Il corso è rivolto *sia a chimici industriali che a chimici*, particolarmente a quelli che intendono svolgere una tesi di argomento elettrochimico, avendo lo scopo di render loro familiare la maggior parte delle apparecchiature e metodologie di base elettrochimiche, applicando concretamente molte delle nozioni teoriche apprese nel Corso di Elettrochimica.

Il corso è formato per circa un quarto di lezioni in aula (richiami ed estensioni di nozioni del corso base di Elettrochimica, descrizione delle apparecchiature e delle modalità operative, esempi di calcolo) e per le restanti ore da esercitazioni in laboratorio, comprendenti una parte pratica ed una di elaborazione (su *foglio elettronico*, di cui verrà illustrato l'uso nel corso delle prime esercitazioni).L'esame, orale (per Chimica Industriale concomitante all'esame del Corso base di Elettrochimica), riguarda sia la parte teorica che pratica del corso.

#### *Programma*

##### **1. Conducibilità delle soluzioni elettrolitiche**

*Strumento: conduttimetro*

*Lezioni:*

Richiami di teoria; descrizione delle apparecchiature; esempi di calcolo

*Esercitazioni:*

· Taratura di una cella conduttimetrica

- Conducibilità specifiche e molari di elettroliti forti (verifica eq. Onsager) e deboli (applicazione eq. di Kraus e Bray per determinazione  $pK_a$ )
- Titolazioni conduttimetriche

## 2. Termodinamica elettrochimica; elettroanalisi

*Strumenti: voltmetro elettronico, pHmetro, elettrodi ionoselettivi; circuito per elettrolisi*

*Lezioni:*

Richiami ed estensioni di teoria; descrizione delle apparecchiature; esempi di calcolo

*Esercitazioni:*

- Preparazione e verifica di elettrodi sensori ad AgCl (con metodo bielettrolitico) e a Hg<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>
- Determinazione del  $\Delta G^\circ$  di reazione della pila Pt/Ag/AgCl/KCl/Hg<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>/Hg/Pt (da misura di f.e.m.)
- Determinazione del  $\tau_{k+}$  da misure di f.e.m. della pila con trasporto Pt/Ag/AgCl/KCl/KCl/AgCl/Ag/Pt
- Misura del pH con elettrometro e con pHmetro: taratura; determinazioni dirette e indirette
- Elettrodi ionoselettivi: costruzione, taratura (pendenza, idealità, limite di rilevabilità...) e uso in misura diretta e indiretta
- Durezza totale e temporanea ed LSI dell'acqua di rete
- Analisi di un'acqua minerale commerciale (k, pH, durezza, LSI, Ca<sup>2+</sup>, Mg<sup>2+</sup>, Cl, HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>)
- Metodo Karl Fischer per la determinazione di tracce di acqua in solventi organici.

## 3. Cinetica elettrochimica

*Strumenti: potenziostato/galvanostato, generatore di funzioni, registratore x/y o y/t; elettrodo di platino a disco rotante; polarografo*

*Lezioni:*

Richiami ed estensioni di teoria; descrizione delle apparecchiature

*Esercitazioni:*

- Polarografie DC e DPP di Pb<sup>2+</sup> e Ni<sup>2+</sup>. Onde "reversibili" e "irreversibili". Determinazione del numero e della costante di complessazione di Pb<sup>2+</sup> con OH<sup>-</sup>
- Prove di uso del sistema [potenziostato/galvanostato + generatore di funzioni + registratore x/y o y/t] in circuiti con resistenze e condensatore variamente disposti: generazione segnali complessi, ciclovoltammetrie, cronopotenziometrie
- Voltammetrie cicliche su Pt in H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>: aree corrispondenti all'adsorbimento e desorbimento di idrogeno ed ossigeno, determinazione di superficie e capacità dell'elettrodo; modifiche in seguito all'adsorbimento di metanolo sull'elettrodo
- Voltammetrie cicliche: effetto della velocità di scansione; criteri per determinare il grado di reversibilità di una reazione
- *Underpotential deposition*: Cu su Pt, (ed esempio di "stripping anodico"), Cu su Au, Pb su Au
- Sistema redox Fe(II)/Fe(III) analizzato su elettrodo di Pt a disco rotante: identificazione delle zone a controllo di trasferimento diffusivo e misto; determinazione dei coefficienti di diffusione, delle costanti di velocità diretta e inversa per il trasferimento elettronico nonché del parametro  $\alpha$
- Sistema redox Fe(II)/Fe(III) analizzato su elettrodo di Pt stazionario: curva di polarizzazione  $i$  vs  $h$  nella zona a bassissime sovratensioni e verifica della linearità "ohmica"
- Sviluppo di ossigeno su catalizzatore ad ossidi di iridio e rutenio: curva di polarizzazione  $i$  vs  $h$  nella zona ad elevate sovratensioni; verifica della linearità  $\eta$  vs  $\log i$  (legge di Tafel) senza e con correzione della caduta ohmica.

Dalla docente verranno fornite ad ogni gruppo dispense sull'intera parte teorica del corso nonché schede con le descrizioni dettagliate delle esperienze di laboratorio e fogli elettronici modello per le elaborazioni dei risultati.

#### **24A. CHIMICA DELLE MACROMOLECOLE (F12024)**

PROF. PAOLO FERRUTI

Crediti Didattici totali: 6

Il corso si propone di dare allo studente una visione completa di sintesi, proprietà, caratterizzazione, lavorazione e usi dei composti macromolecolari.

Più in particolare, i seguenti argomenti specifici costituiranno nell'ordine gli oggetti delle lezioni:

- definizioni generali
- masse molecolari: valori medi e distribuzione
- processi di sintesi dei polimeri
- policondensazione e poliaddizioni a stadi
- polimerizzazioni a catena
- polimerizzazione radicalica
- polimerizzazioni ioniche
- polimeri stereoregolari, polimerizzazioni stereospecifiche
- copolimerizzazione
- degradazione e stabilizzazione dei polimeri
- caratterizzazione molecolari dei polimeri
- polimeri in soluzione
- determinazione dei pesi molecolari dei polimeri
- stato amorfo e stato cristallino dei polimeri
- caratterizzazione termica dei polimeri
- caratterizzazione meccanica dei polimeri
- lavorazione dei polimeri
- principali polimeri sintetici di interesse industriale
- polimeri naturali
- reazioni di trasformazione dei polimeri
- applicazioni biomediche e farmacologiche dei polimeri

Prove scritte di apprendimento non obbligatorie (di regola tre) saranno effettuate durante il corso.

*Testi consigliati:*

AIM - "Macromolecole scienza e tecnologia", Pacini Editore

F.W. Billmeyer, "Textbook of Polymer Science", John Wiley & Sons

#### **24B. LABORATORIO DI CHIMICA DELLE MACROMOLECOLE (F12024)**

PROF. PAOLO FERRUTI

Crediti Didattici totali: 6

*Premessa*

Lo studente alla fine del corso dovrà avere gli elementi fondamentali per la sintesi, per lo studio spettroscopico, per la determinazione del contenuto in unità monomeriche, delle proprietà in soluzione ed allo stato solido, per la determinazione delle masse molecolari e della loro distribuzione di polimeri ottenuti mediante differenti metodi di polimerizzazione. Nello studio della copolimerizzazione oltre al contenuto in unità monomeriche saranno importanti i metodi di determinazione dei parametri di reattività dai dati di composizione e di microstruttura. Il corso è complementare a Chimica macromolecolare. Gli esperimenti didattici, in mancanza del laboratorio ad essi addetto, saranno fatti nei laboratori di ricerca del docente presso il dipartimento di chimica organica ed industriale e saranno organizzati in accordo con il numero di studenti.

*Programma*

Tecniche di sintesi in ambiente inerte ed anidro. Purificazione di solvente e monomero a grado adeguato per la

polimerizzazione radicalica di stirene e metilmetacrilato in soluzione. Determinazione delle masse molecolari mediante viscosimetria e cromatografia per esclusione sterica (SEC). Determinazione della costante di trasferimento nella polimerizzazione radicalica, parametri di reattività nella copolimerizzazione di acrilati ottenuti per group transfer polymerization. Polimerizzazione anionica dello stirene e misura della dispersione delle masse molecolari; confronto con i valori ottenuti per via radicalica. Polimerizzazione interfacciale ed idrolitica per l'ottenimento di poliammidi e poliesteri. Polimerizzazione cationica del p-metossi stirene. Studio della microstruttura del polipropilene e di polibutadieni da esperimenti  $^{13}\text{C}$  NMR; valutazione statistica del processo di controllo della microstruttura. Valutazione dei parametri termici di polimeri da misure DSC.

## **25A. CHIMICA ORGANICA APPLICATA (F12025)**

PROF. STEFANO MAIORANA

Crediti Didattici totali: 6

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 e di sicurezza delle reazioni e dei prodotti.

Si tengono inoltre alcune lezioni sulla ricerca bibliografica, manuale e on-line.

Esperti dell'industria, di cui un professore a contratto, contribuiranno con lezioni su argomenti specifici allo svolgimento del corso.

Durante il corso potranno anche tenersi esercitazioni di vario tipo (ricerca bibliografica, progettazione di sintesi di prodotti industriali ecc.)

### *1) Anti-Infiammatori non steroidei*

- Derivati dell'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
  - Penam e derivati
  - Tienamicina
  - Nocardicine
  - Monobattami
- B) Antibiotici macrolidici
  - Eritromicina: sviluppo del processo biotecnologico di produzione.
- C) Antibiotici vari (cenni)
  - Macrolidi
  - Amminoglicosidi
  - Tetracicline
  - Lincomicine
  - Polipeptidi
  - Altri



- D) 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) *Fitofarmaci*

Caratteristiche generali, classificazione, cenni su meccanismi di azione. Vengono esaminati in particolare i principi attivi in relazione al loro utilizzo ed ai metodi di sintesi.

Fungicidi  
Insetticidi  
Erbicidi

5) *Ricerca bibliografica*

Metodi per il reperimento dell'informazione chimica. Fondamenti di organizzazione delle principali collezioni scientifiche.

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

**25B. LABORATORIO DI CHIMICA ORGANICA APPLICATA (F12025)**

PROF.SSA EMANUELA LICANDRO

Crediti Didattici totali: 6

*Parte prima* (svolta nelle lezioni del mattino)

Verranno insegnati i principi base della ricerca bibliografica, la logica della catalogazione di tutta la letteratura scientifica, la definizione di letteratura primaria e letteratura secondaria, una rassegna delle riviste più significative e utili per il chimico organico. Inoltre si illustreranno i diversi metodi di ricerca bibliografica sulle due principali fonti della letteratura secondaria "Chemical Abstract" e "Beilstein".

Si illustrerà l'utilizzo di databases specificamente elaborati ed organizzati per rendere agevole e mirata la ricerca di molecole, reazioni e dati associati ad esse. Si organizzeranno quindi esercitazioni pratiche di ricerca bibliografica.

*Parte seconda* (svolta in laboratorio nel pomeriggio)

Esercitazioni in laboratorio a banco singolo, si effettuerà la sintesi, a più stadi di una molecola ad attività biologica, la scelta dei reagenti e delle condizioni di reazione (solvente, temperatura, pressione, atmosfera inerte), nonché dell'isolamento dei prodotti, verrà fatta conto della fattibilità della sintesi stessa su scala industriale.

*Parte terza*

Verrà illustrato il funzionamento di un impianto pilota ed effettuata una esercitazione pratica di gruppo sullo stesso.

**26A. CHIMICA DELLE SOSTANZE ORGANICHE NATURALI (F12026)**

(mutuato da Chimica)

PROF. PAOLO MANITTO

Crediti Didattici totali: 6

Vedi programma n° 42 nel settore di Chimica.

## **26B. LABORATORIO DI CHIMICA DELLE SOSTANZE ORGANICHE NATURALI (F12026)**

PROF.SSA GIOVANNA SPERANZA

Crediti Didattici: 6

Il corso, attraverso una serie di 10-12 esperimenti, intende fornire allo studente l'esperienza di base per l'isolamento e la caratterizzazione di sostanze naturali di varia origine e struttura chimica.

- In particolare verranno utilizzate le principali tecniche di separazione e purificazione, di controllo analitico cromatografico, e di analisi strutturale.

- Verranno eseguite anche semplici trasformazioni chimiche per la soluzione di particolari problemi strutturali, ad esempio correlazioni steriche.

### *Testi consigliati*

Raphael Ikan, Natural Products. A Laboratory Guide, 2nd ed., Academic Press, 1991.

## **27A. CHIMICA FISICA DELLA CATALISI (F12027)**

PROF. LUCIO FORNI

Crediti Didattici totali: 6

### *Funzione del catalizzatore (crediti didattici 1):*

Definizione della catalisi. Struttura delle particelle di catalizzatore. Stadi della reazione catalitica. Adsorbimento. Diffusione. Diagnosi della funzione del catalizzatore.

### *Struttura del catalizzatore:*

Architettura del catalizzatore: che cosa contiene e perché. Polifunzionalità. Equilibrio fra i componenti: miglior compromesso.

### *Sviluppo del processo catalitico (crediti didattici 1):*

Requisiti del processo. Definizione del problema e degli obiettivi. Ricerca del catalizzatore. Progetto del catalizzatore. Prove sul catalizzatore, in laboratorio e in impianto pilota. Progetto del processo.

### *I materiali catalitici:*

Tipi di materiali catalitici. Metalli. Semiconduttori. Isolanti. Solidi acidi.

### *Progetto del catalizzatore (crediti didattici 1):*

Componenti attivi, supporti, promotori. Ossidi binari. Tecniche di preparazione: precipitazione, impregnazione, spray-drying. Catalizzatori speciali. Produzione industriale dei catalizzatori. Formatura. Resistenza meccanica. Responsabilità legali.

### *Caratterizzazione del catalizzatore (crediti didattici 1):*

Proprietà di massa. Proprietà delle particelle. Proprietà superficiali. Attività.

### *Disattivazione del catalizzatore (crediti didattici: 1):*

Effetto della deattivazione. Cause della deattivazione. Veleni: avvelenamento reversibile e irreversibile.

### *Spettroscopia IR in catalisi (crediti didattici 1):*

Teoria e applicazioni della spettroscopia IR alla caratterizzazione dei catalizzatori. Apparecchiature. Disegno della cella IR. Spettri di catalizzatori solidi. Studio dei gruppi superficiali nei catalizzatori e nei supporti. Studio dell'acidità e basicità superficiale mediante adsorbimento di molecole sonda.

### *Desorbimento a temperatura programmata:*

Teoria e applicazioni del desorbimento a temperatura programmata di molecole sonda alla caratterizzazione dei catalizzatori. Tecnica sperimentale. Analisi degli spettri TPD. Applicazione allo studio dell'acidità e basicità

superficiale.

*Testi consigliati:*

J.T. Richardson, Principles of catalyst development, Plenum Press, New York, 1989

J.M. Thomas, W.J. Thomas, Principles and Practice of Heterogeneous Catalysis, VCH, Weinheim, 1997

B. Imelik, J.C. Vedrine (Eds.), Catalyst characterization: physical techniques for solid materials, Plenum Press, New York, 1994

F. Delannay (Ed.), Characterization of heterogeneous catalysts, Dekker, New York, 1984.

**27B. LABORATORIO DI CHIMICA FISICA DELLA CATALISI (F12027)**

PROF. LUCIO FORNI

Crediti Didattici totali: 6

Le esercitazioni pratiche, eseguite a gruppi di 3-4 studenti, consistono nella preparazione, caratterizzazione e impiego di alcuni catalizzatori ossidici per la combustione catalitica (flameless) del metano.

Ciascun gruppo di studenti:

- segue le lezioni esplicative (totale di 15 ore) e quindi
- prepara un catalizzatore (12 ore)
- caratterizza il catalizzatore da lui preparato mediante le tecniche: TGA (5 ore), XRF (8 ore), EPR (4 ore), TPD (4 ore), XPS (4 ore), XRD (4 ore), BET (8 ore)
- esegue una prova di attività catalitica a temperature crescenti, per individuare il punto di "light off" e il punto di esaurimento del reagente (6 ore)
- stende una relazione dettagliata sul lavoro svolto, sui calcoli eseguiti e sui risultati ottenuti (20 ore).

**28. CHIMICA FISICA DEI MATERIALI (F12028)**

(vedi programma 20A)

**29. CHIMICA DELLE FERMENTAZIONI E MICROBIOLOGIA INDUSTRIALE (F11048)**

(vedi programma 48 nel settore di Chimica)

**30. CHIMICA DELLE SOSTANZE ORGANICHE NATURALI (F12042)**

(vedi programma 42 nel settore di Chimica)

**31. Elettrochimica (F12031)**

(vedi programma 23A)

**32. CHIMICA DELLE MACROMOLECOLE (F12032)**

(vedi programma 24A)

**33. CHIMICA ORGANICA APPLICATA (F12033)**

(vedi programma 25A)

**34. CHIMICA FISICA DELLA CATALISI (F12034)**

(vedi programma 27A)

### **35. SCIENZA DEI METALLI (F12035)**

PROF. SERGIO TRASATTI

Crediti Didattici totali: 6

#### *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. Schrodinger. 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*, Mac Millan.

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

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

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

### **36. CRISTALLOCHIMICA (F12036)**

**NON ATTIVATO**

**37. SINTESI E TECNICHE SPECIALI ORGANICHE (F12037)**

NON ATTIVATO

**38. CHIMICA ORGANICA III (F12038)**

PROF.SSA EMANUELA LICANDRO

Crediti Didattici totali: 6

In attesa programma

**39. CHIMICA METALLORGANICA (F12039)**

PROF.SSA MADDALENA PIZZOTTI

Crediti Didattici totali: 6

Il corso intende fornire gli strumenti indispensabili per una piena comprensione dei diversi processi in cui i metalli risultano attivi (sintesi stechiometriche cicli catalitici, specie ad attività bio- e/o farmacologica, composti modello, ecc.). valutando i contenuti e gli obiettivi dell'orientamento in cui si inserisce questo corso, nonché le attuali prospettive delle produzioni industriali, un accento particolare verrà dato alle interazioni metallo carbonio e quindi alla reattività al carbonio in molecole organiche. Verranno considerati anche semplici casi di interazione metallo-idrogeno, metallo-azoto e metallo-ossigeno.

- 1) Generalità sul legame metallo-carbonio. Stabilità termodinamica e cinetica.
- 2) Litio, Magnesio e Alluminio alchili.
- 3) Silicio, Boro, Stagno e Piombo.
- 4) Il legame metallo-carbonio nei metalli di transizione. Cenni alla teoria degli orbitali molecolari. Complessi (s) e (p).
- 5) Tipi di leganti: (s) donatori, (p) donatori e (p) accettori.
- 6) Regola dei 18 elettroni e sue eccezioni.
- 7) Metallo-idruri.
- 8) Complessi con olefine, dieni e acetilenici.
- 9) Metallo-carbonili.
- 10) Metallo-ciclopentadienili. Complessi a sandwich. Complesso con areni.
- 12) Complessi allilici. Complesso carbenici e nitrenici.
- 13) Complessi con il diossigeno. Perossido, superossido e osso composti.
- 14) Legame metallo-metallo. Clusters di metalli di transizione.
- 15) Reazioni di scambio di leganti.
- 16) Somme ossidative ed eliminazioni riduttive.
- 17) Reazioni di inserzione-migrazione e di trasferimento elettronico.
- 18) Ruolo dei complessi nella catalisi omogenea.

**40. CHIMICA DEI PROCESSI BIOTECNOLOGICI (F12040)**

PROF. UMBERTO VALCAVI

Crediti Didattici totali: 6

*Scopo del corso :*

Il corso si propone di illustrare agli studenti:

- i processi utilizzati industrialmente per la produzione e la separazione dei principali prodotti ottenuti con le biotecnologie ,
- impianti industriali usati nelle biotecnologie ,
- prevedibili sviluppi industriali futuri delle biotecnologie,
- nozioni di carattere economico relative ai prodotti e impianti biotecnologici industriali.

*1) Uso di enzimi in alcuni processi industriali:*

- produzioni industriali di derivati di carboidrati, e produzioni industriali di amminoacidi,
- produzioni industriali di steroidi cortisonici( anti-infiammatori),
- produzioni industriali di plastiche biodegradabili e alcune altre sostanze.

*2) Impianti industriali usati nelle biotecnologie:*

- fermentatori industriali e impianti industriali per separare le cellule,
- uso delle membrane nei processi industriali,
- impianti industriali per separare, estrarre e purificare i prodotti delle biotecnologie,
- impianti industriali per essiccare i prodotti, per le liofilizzazioni e "spray-dryers",
- impianti industriali sterili.
- trattamento degli effluenti e dei residui delle separazioni biotecnologiche.

*3) Esempi di separazione di prodotti ottenuti con le biotecnologie classiche:*

- acido citrico, acido glutammico, enzimi,
- penicilline e cefalosporina C , acido clavulanico,
- tetracicline e derivati semisintetici,
- rifamicine e derivati semisintetici,
- doxorubicina ( antitumorale) e derivati semisintetici,
- vitamina B12 e derivati semisintetici.

*4) Esempi di separazione di prodotti ottenuti con le tecniche del DNA-ricombinante:*

- insulina,
- ormone umano della crescita hGH,
- antitrombotici tPA,
- interferoni.

*5) Nozioni di carattere economico:*

- vendite e fatturato dei principali prodotti ottenuti con le tecniche del DNA-ricombinante, previsioni future e prodotti in sviluppo,
- studio di fattibilità economica di alcuni impianti per la produzione di sostanze mediante la tecnica del DNA-ricombinante,
- bilanci economici delle principali aziende biotecnologiche internazionali.

Capitoli 1) + 2) = crediti parziali = 3

Capitoli 3) + 4) + 5) = crediti parziali = 3

*Testi consigliati:*

- Umberto Valcavi " Dispense di Chimica dei Processi Biotecnologici "
- eventualmente da consultare:
  - a) B. Atkinson, F. Mavituna " Biochemical Engineering and Biotechnology Handbook ", 2nd. ed. , Stockton Press, Macmillan Publ., New York,1991 ;
  - b) Elliott Goldberg " Handbook of Downstream Processing", Blackie Ac. and Professional, Chapman and Hill, New York, 1997 ;
  - c) B.K. Lydersen, N.A. D'Elia, K.L. Nelson " Bioprocess Engineering : Systems, Equipment and Facilities", J. Wiley and Sons, New York, 1994

**41. MISURE ELETTRICHE (F12041)**

**NON ATTIVATO**

**42. CORROSIONE E PROTEZIONE DEI MATERIALI METALLICI (F12042)**

PROF. FRANCESCO MAZZA

Crediti Didattici totali: 6

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 da 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 conversione, 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. Sistemi esperti. Riviste specializzate e fondamenti bibliografici. Abstracts.

*Testi consigliati*

G. Bianchi, F. Mazza, Corrosione e protezione dei metalli, Ed. Masson s.p.a., Milano, 1989.

**43. CHIMICA ANALITICA (DEI MATERIALI) (F12043)**

**NON ATTIVATO**

#### **44. CHIMICA INORGANICA (DEI MATERIALI) (F12044)**

Crediti Didattici totali: 6

- (crediti parziali:1) Argille e materiali correlati: strutture e applicazioni.
- (crediti parziali:2) Ossidi metallici e non metallici: metodi di preparazione, caratteristiche ed applicazioni.  
Refrattari.  
Modificazioni allotropiche del carbonio: carboni attivi e modificazioni delle superfici.
- (crediti parziali:1) Stato vetroso: ottenimento e proprietà. Proprietà ottiche ed applicazioni.
- (crediti parziali:2) Metalli nobili: proprietà generali, preparazioni e usi. Nanoparticelle.  
Terre rare: fonti, estrazione, separazione, utilizzo. Proprietà magnetiche ed applicazioni.  
Indagine superficiale: acidità superficiale, SEM, EPR, NMR in solido.

Il corso si avvarrà di alcune esperienze di laboratorio.

#### **45. CHIMICA ORGANICA (DEI MATERIALI) (F12045)**

**NON ATTIVATO**

#### **46. NESSUN INSEGNAMENTO CODIFICATO**

#### **47. ELETTROCHIMICA (INDUSTRIALE) (F12047)**

PROF.SSA SANDRA RONDININI

Crediti Didattici totali: 6

##### *Introduzione*

L'industria elettrochimica: sviluppi e prospettive.

##### *Valutazioni di processo*

Costi. Parametri di merito. Parametri dei reattori elettrochimici.

##### *Principi di disegno di cella*

Processi elettrolitici: trasporto di materia, distribuzione di corrente, connessione di celle. Tipologia dei reattori elettrochimici: processi continui e discontinui, PFR, CSTR, elettrodi convenzionali e tridimensionali.

##### *Processi elettrochimici di interesse industriale*

Estrazione e raffinazione di metalli. Trattamenti superficiali di metalli: elettrodeposizione, anodizzazione, verniciatura. Lavorazione di metalli: electroforming, electromachining, electroetching. Processi elettrolitici inorganici. Elettrosintesi organiche. Trattamento delle acque e protezione ambientale: elettrodialisi, recupero e rigenerazione di reagenti, altri processi di separazione.

##### *Pile e batterie primarie e secondarie*



#### **48. SINTESI E TECNICHE SPECIALI INORGANICHE (F12048)**

PROF. GUIDO BANDITELLI

Crediti Didattici totali: 6

Materie prime, intermedi e prodotti inorganici di ampio impiego: metodi di sintesi, produzioni industriali, proprietà e applicazioni, mercato e prospettive.

Catalizzatori inorganici: struttura e proprietà, preparazione e esempi di applicazioni industriali.

Classi selezionate di complessi di metalli di transizione: sintesi, caratterizzazione e reattività.

Impieghi in processi industriali e prospettive nella chimica fine. Recupero di metalli pregiati: metodi industriali e innovazione.

Durante il corso è prevista la visita a impianti industriali e saranno possibili esercitazioni in laboratorio.

*Principali riferimenti bibliografici:*

- W. Büchner, R. Schliebs, G. Winters, K.H. Büchel, "Industrial Inorganic Chemistry", 2nd Ed. 1989 VCH, Weinheim (Federal Republic of Germany); Id., "Chimica Inorganica Industriale", 1 Ed. Ital., 1996 PICCIN (Padova).
- "The Modern Inorganic Chemicals Industry", R. Thompson Ed., 1977 Royal Society of Chemistry, London.
- "Industrial Inorganic Chemicals: Production and Uses", R. Thompson Ed., 1995 Royal Society of Chemistry, London.
- B.C. Gates, "Catalytic Chemistry", 1992 J. Wiley & Sons, New York.
- G.W. Parshall and S.D. Ittel, "Homogeneous Catalysis", 2nd Ed., 1992 J. Wiley & Sons, New York.
- "Insights into Speciality Inorganic Chemicals", D. Thompson Ed., 1995 Royal Society of Chemistry, London.
- "L'Industria Chimica in Italia" Rapporti Annuali Federchimica; "L'Industria Chimica in cifre", idem.

#### **49. CINETICA CHIMICA E DINAMICA MOLECOLARE (F12049)**

PROF. PAOLO CARNITI

Crediti Didattici totali: 6

Richiami di cinetica chimica elementare. Esperimenti cinetici.

Reazioni parallele e consecutive. Reazioni a catena.

Catalisi omogenea. Autocatalisi. Catalisi enzimatica.

Catalisi eterogenea. Equazioni per la cinetica intrinseca.

Limitazioni diffusive, efficacia dei catalizzatori.

Modelli matematici e ottimizzazione dei parametri cinetici.

Cinetica delle reazioni tra gas e solidi non catalitici. Cinetica delle reazioni tra gas e liquidi.

Teorie della cinetica chimica: teoria delle collisioni, teoria dello stato di transizione.

Correlazioni cinetiche.

*Testo consigliato:*

J.W. Moore, R.G. Pearson, Kinetics and Mechanism, J. Wiley, New York, 1981.

#### **50. BIOCHIMICA INDUSTRIALE (F12050)**

PROF. MARCO VANONI

Crediti Didattici totali: 6

Il corso di Biochimica Industriale intende approfondire argomenti e problematiche attuali relative all'applicazione delle tecniche e delle metodologie biochimiche ad applicazioni industriali. Verranno esaminate in dettaglio due aree principali: le bioconversioni enzimatiche e l'utilizzo di macromolecole informazioni nel riconoscimento molecolare, con particolare enfasi sulle possibilità di ingegnerizzazione razionale delle macromolecole.

*Bioconversioni*

Problematiche generali relative all'utilizzo di enzimi – tanto in soluzione che immobilizzati. Gli anticorpi catalitici. Esame di alcuni processi industriali. Identificazione di potenziali passi limitanti. Applicazioni di alcune classi di enzimi (lipasi, proteasi, carboidrolasi) nell'industria chimica, farmaceutica manifatturiera ed alimentare. Cenni di scaling-up.

#### *Ingegneria proteica*

Richiami dei principali sistemi di espressione. Richiami di mutagenesi sitospecifica, randomizzata e localizzata. Scelta del sistema di espressione. Produzione di proteine chimeriche e loro uso nello studio di domini funzionali, interazioni proteina/proteina e come ausilio nella purificazione. Mutagenesi razionale in assenza di informazioni strutturali: alanine scanning delle interfacce proteiche. Screening funzionali in vivo. Sistemi per l'espressione di varianti proteiche: proteine di fusione espresse su fagi filamentosi, clonaggio di anticorpi da librerie, two-hybrid system. Design de novo di molecole proteiche: betabelline e proteine a struttura ripetitiva.

#### *Sonde molecolari*

Sonde ad acidi nucleici: principi ed applicazioni. Sonde nonradioattive. Anticorpi monoclonali: preparazione, caratterizzazione e problematiche inerenti all'allestimento di un kit diagnostico. Diagnostica in vivo: gli immunoconiugati, tecniche di sintesi ed applicazioni. Principali di drug targeting: immunotossine e ligandotossine. Anticorpi catalitici.

#### *Biosensori*

Generalità. Design di un biosensore. La scelta del detector biologico: enzimi o anticorpi. Biosensori e difesa dell'ambiente.

**51. ELETTROCHIMICA APPLICATA (F12051) NON ATTIVATO**

**52. METALLURGIA FISICA (F12052) NON ATTIVATO**

**53. FOTOCHIMICA (F12053)**

DOSS. SSA ELENA SELLI

Crediti Didattici totali: 6

#### *Introduzione*

Reazioni termiche e fotochimiche. La natura della luce. Stati elettronici di molecole poliatomiche.

#### *Produzione e proprietà di stati eccitati*

Assorbimento di luce. Tempi di vita, proprietà geometriche e acido-base di stati eccitati. Energie degli stati eccitati, effetto del solvente.

#### *Cammini di decadimento di stati eccitati*

Rilassamento vibrazionale, transizioni radiative e non radiative. Cinetica di spegnimento di stati eccitati, eccimeri e ecciplessi. Cinetica e meccanismi di reazioni fotochimiche.

#### *Tecniche sperimentali*

Sorgenti di luce convenzionali, attinometria. Lasers. Spettroscopia di luminescenza. Tecniche pulstate: laser flash photolysis, radiolisi a impulsi, luminescenza risolta nel tempo.

#### *Processi fotochimici in natura*

Fotosintesi. Processo visivo. Reazioni fotochimiche nell'atmosfera e inquinamento dell'aria.

#### *Fotochimica di polimeri*

Meccanismi di fotopolimerizzazione e fotoreticolazione. Fotoiniziatori. Fotoinnesto di monomeri per la modifica superficiale di polimeri. Stabilità di polimeri alla luce. Caratterizzazione di polimeri mediante tecniche allo stato eccitato.

#### *Fotocatalisi*

Processi fotoelettrochimici su semiconduttori, aspetti termodinamici e cinetici. La fotocatalisi nella conversione di energia solare e nella degradazione di inquinanti.

#### *Altre applicazioni*

Fotocromismo. Sintesi fotochimiche. Il processo fotografico.

### **54. METALLURGIA (F12054)**

PROF. ENRICO SIVIERI

Crediti Didattici totali: 6

#### *La metallurgia di processo:*

materie prime, trattamenti preliminari, pirometallurgia, idrometallurgia, elettrometallurgia, colata dei metalli e solidificazione.

#### *Cenni di fisica dei metalli:*

il legame nei metalli, reticoli cristallini e metodi per il loro studio, imperfezioni reticolari, metalli e leghe allo stato liquido, solidificazione, meccanismi di rafforzamento.

#### *Diagrammi di stato delle leghe metalliche:*

la fase vapore, la fase liquida, le fasi solide, trasformazioni di fase, regole generali per l'interpretazione dei diagrammi di stato, diagramma ferro-carbonio, raffreddamenti in condizioni di non-equilibrio.

#### *Trattamenti termici:*

generalità sui trattamenti termici, punti critici, esperienza di Bain, curve anisotenne, temprabilità degli acciai, strutture metallografiche degli acciai, trattamenti termici di interesse applicativo, trattamenti termici non tradizionali.

#### *Metodi di studio e controllo dei metalli:*

caratteristiche meccaniche, prove di resistenza a trazione, a compressione, a flessione, a scorrimento a caldo, di durezza, di resistenza all'urto, a fatica; microscopia ottica, elettronica, analisi EDS-WDS, analisi delle superfici, controlli non distruttivi.

#### *Proprietà del ferro ed influenza di eteroatomi:*

gli acciai, acciai da costruzione, per utensili, inossidabili, per usi particolari, superleghe, le ghise.

#### *Metalli e leghe non ferrose:*

leghe leggere, leghe di alluminio, di magnesio, di titanio; leghe resistenti alla corrosione, leghe di nichel, di cromo, di molibdeno; leghe per scambio termico, leghe di rame; leghe per usi particolari.

#### *Metallurgia delle polveri:*

metodi di produzione e controllo, operazioni di pressatura, trattamenti termici, caratteristiche meccaniche dei sinterizzati.

### **55. CHIMICA DEI COMPOSTI ORGANOMETALLICI (F12070)**

PROF.SSA PAOLA DEL BUTTERO

Crediti Didattici totali: 6

Il corso si pone come obiettivo di dare allo studente, indirizzato essenzialmente alla sintesi organica, alcune informazioni essenziali al completamento del suo curriculum didattico.

Infatti l'impiego sempre crescente negli ultimi dieci anni anche da parte dell'industria chimica di metalli come ausiliari alla sintesi organica, implica che il futuro chimico industriale sia a conoscenza delle strutture e dei meccanismi che regolano l'utilizzo e le potenzialità sintetiche di derivati organometallici.

La filosofia comunque del chimico organico è quella di considerare il metallo legato al substrato organico come mezzo

per la realizzazione di un processo sintetico al fine di realizzare reazioni altrimenti impossibili, di migliorare la qualità dei prodotti, la resa e, quando sia necessario, la diastereoselezione.

A questo scopo le informazioni che verranno date possono essere riassunte:

- 1) Introduzione e cenni storici
- 2) Principi generali sulle strutture e natura dei legami
- 3) Sintesi e caratterizzazione dei complessi
- 4) Utilizzo dei complessi in sintesi organica:
  - a) Complessi organometallici come gruppi protettori e stabilizzanti
  - b) Complessi organometallici come elettrofili  
Reazioni di addizione nucleofila a metallo cationi  
Reazioni di addizione e sostituzione nucleofila coinvolgenti complessi neutri
  - c) Complessi organometallici come nucleofili:  
Complessi neutri come nucleofili  
Complessi anionici come nucleofili
  - d) Reazioni di ossidazione
  - e) Reazioni di riduzione
  - f) Reazioni di isomerizzazione
- 5) Applicazione dei composti organometallici alla sintesi di prodotti di base e di intermedi per l'industria farmaceutica
- 6) Recenti applicazioni di composti organometallici in campo bio-medico

Oltre alle lezioni ex-cattedra, largo spazio verrà dedicato alle esercitazioni di pianificazione di sintesi in modo da poter valutare l'incidenza dell'utilizzo di un complesso organometallico in relazione alla medesima reazione condotta con metodi tradizionali.

Inoltre, in considerazione del fatto che la chimica organometallica è in continua e rapida evoluzione, particolare attenzione verrà rivolta al reperimento di informazioni relative a questo settore e all'aggiornamento bibliografico.

*Agli studenti verrà fornito materiale didattico sotto forma di fotocopie dei lucidi utilizzati per le lezioni.*

## **56. CHIMICA FISICA DELLO STATO SOLIDO E DELLE SUPERFICI (PER LA CATALISI) (F12071)**

DOSSA ANTONELLA GERVASINI

Crediti Didattici totali: 6

### **Parte I: Struttura Elettronica e Chimica dei Solidi.**

Classificazione chimica dei solidi: solidi molecolari, solidi ionici, solidi metallici, solidi complessi.

Conducibilità elettrica nei solidi metallici, isolanti e semiconduttori. Distribuzione statistica di Fermi-Dirac. Fenomeni di superconduttività in leghe e solidi intermetallici.

Difetti e Impurezze nei Solidi: classificazione strutturale ed elettronica dei difetti.

Conseguenze elettroniche dei difetti: funzioni di Bloch.

Semiconduttori drogati: impurezze donatrici ed accettrici. Misura delle proprietà elettroniche: effetto Hall ed effetto Seebeck.

Difetti degli ossidi puri semiconduttori, e dei solidi ionici.

Solidi altamente disordinati: transizione di Anderson.

Stati eccitati: eccitone Wannier e Frenkel.

Superfici: funzione lavoro, effetto termoionico, equazione di Richardson-Dushman.

### **Parte II: Ruolo delle Superfici nelle Reazioni in Fase Solida.**

Termodinamica e cinetica dei processi di nucleazione. Accrescimento dei nuclei. Fenomeni di inglobamento. Esempi di reazioni.

Ottenimento di solidi ad area superficiale elevata: trattamenti chimici, termici, di frantumazione e di dispersione.

### **Parte III: Proprietà delle Superfici.**

Proprietà termodinamiche delle superfici.

Interazione delle fasi fluide con le superfici. Forze superficiali a corto e a lungo raggio.  
Interazioni adsorbente-adsorbato specifiche e non specifiche.  
Fenomeni di adsorbimento. Curve di Lennard-Jones per l'energia potenziale di fenomeni di adsorbimento su superfici omogenee ed eterogenee, eterogeneità intrinseca ed indotta.  
Termodinamica dei processi di adsorbimento. Equazione di Gibbs-Duhem ed isoterma di adsorbimento di Gibbs. Calore di adsorbimento: calore differenziale ed integrale.  
Determinazione di funzioni termodinamiche da misure sperimentali di isoterme di adsorbimento e calori di adsorbimento.  
Distribuzione energetica dei siti di adsorbimento di superfici eterogenee. Le isoterme empiriche per l'adsorbimento fisico e chimico. Esempi numerici.  
Cinetica dei processi di adsorbimento: equazione di Elovich differenziale ed integrata.  
Fenomeni di adsorbimento su solidi semiconduttori, influenza sulla posizione del livello di Fermi.  
Adsorbimento chimico in relazione ai processi catalitici.

#### **Parte IV: Caratterizzazione dei Solidi e delle loro Superfici.**

Descrizione dei principali metodi fisici per lo studio dei solidi e delle superfici.  
Tecniche di tipo chimico, tecniche chimico-fisiche statiche, tecniche spettroscopiche: spettroscopie fotone-elettrone, spettroscopie fotone-fotone.

#### **Parte V: Relazione tra Proprietà di Superficie e Catalisi.**

L'acidità dei solidi. Definizione di acidità. Classificazione dei solidi acidi/basici. Metodi di misura dell'acidità superficiale: metodi acquosi, metodi in solventi non-acquosi, metodi gas-solido.  
La dispersione metallica. Solidi catalitici composti a metallo disperso.

#### *Testi consigliati:*

S.R. Morrison, The Chemical Physics of Surfaces, Plenum Press, New York, 1978.  
A.W. Adamson, Physical Chemistry of Surfaces, John Wiley, New York, 1982.  
J.R. Anderson, K.C. Pratt, Introduction to Characterization and Testing of Catalysts Academic Press, Sidney, 1985.  
G.A. Somorjai, Introduction to Surface Chemistry and Catalysis, J. Wiley, New York, 1994.

### **57. CHIMICA E TECNOLOGIA DEI POLIMERI (F12072) 5° anno**

PROF. GIUSEPPE DI SILVESTRO

Crediti Didattici totali: 6

#### *Scopo del corso*

Lo studente alla fine del corso dovrebbe conoscere:

- a) gli aspetti chimici (meccanismo e controllo delle masse molecolari in funzione delle proprietà richieste);
- b) gli aspetti tecnologici dei processi industriali di produzione di polimeri (polimerizzazione in massa, in soluzione, in sospensione, ecc.);
- c) le proprietà e gli usi finali dei materiali polimerici più importanti;
- d) i processi di trasformazione.

Il corso utilizza le conoscenze date nell'insegnamento di chimica delle macromolecole anche se verranno ricordati, ove necessario, i concetti principali di scienza delle macromolecole.

#### *Programma del corso*

Saranno illustrati i processi industriali di produzione di polimeri tenendo conto del meccanismo coinvolto (radicalico, ionico, ecc.) del meccanismo di crescita delle macromolecole (policondensazione, poliaddizione) e della tecnologia di produzione.

La maggiore attenzione sarà per i processi produttivi e di trasformazione dei polimeri e delle miscele di più elevato

consumo; saranno illustrati esempi di polimeri per usi speciali (polimeri per applicazioni biomediche, per rivestimenti protettivi anticorrosione ecc.).

Principali tecniche di trasformazione dei polimeri.

Morfologia dei materiali polimerici, relazione con le proprietà per effetto dei processi di trasformazione e di compatibilizzazione.

Stabilizzazione e degradazione dei materiali e loro riciclo.

Ove possibile, saranno organizzati sia interventi di responsabilità di gestione di impianti di produzione o la visita agli impianti stessi.

**CONSIGLIO DEL CORSO DI LAUREA  
IN CHIMICA INDUSTRIALE**

**PRESIDENTE**

Prof. Paolo Beltrame – Dipartimento di Chimica Fisica e Elettrochimica

**SEGRETERIA DIDATTICA CHIMICA**

Via Venezian, 21

Orario 10-12 dal lunedì al venerdì

Informazioni

Orario delle lezioni

Domanda di entrata tesi

Varie

**RAPPRESENTANTI DEGLI STUDENTI NEL C.C.L.**

Marco De Palma

Elisa Emiltri

Francesco Marchesi

Rosamaria Sommario

**COMMISSIONE PIANI DI STUDIO E TRASFERIMENTI**

Prof. Lucio Forni - Dip. Chimica Fisica ed Elettrochimica

Prof.ssa Rita Annunziata - Dip. Chimica Organica e Industriale

Prof. Guido Banditelli - Dip. Chimica Inorganica, Metallorganica e Analitica

**COMMISSIONE PER LA TESI DI LAUREA**

Prof. Francesco Mazza (Presidente) - Dip. Chimica Fisica ed Elettrochimica

Prof.ssa Maddalena Pizzotti - Dip. Chimica Inorganica, Metallorganica e Analitica

Prof. Paolo Ferruti - Dip. Chimica Organica e Industriale

**ISCRITTI\* A CHIMICA INDUSTRIALE PER L'A.A. 1997/98 (dati al 24 giugno 1998)**

Anno di corso	I	II	III	IV	V	F.C.	totale
Totali iscritti:	117	97	88	108	82	207	699

\* Dati dei soli iscritti al Corso di Laurea del Nuovo Ordinamento

**ELENCO DEI CORSI E DOCENTI  
DEL CORSO DI LAUREA IN CHIMICA INDUSTRIALE  
A.A. 1998/99**

codice	anno	n°	insegnamento	docenti	dipartimento
<b>Triennio Propedeutico</b>					
F12001	1	01	ISTITUZIONI DI MATEMATICHE (1° corso)	ALESINA	MAT
F12002	1	02	CHIMICA GENERALE E INORGANICA/ LAB. CHIMICA GEN. E INORG. A e B	ROSSI BANDITELLI PIZZOTTI	CIMA CIMA CIMA
F12003	1	03	CHIMICA ANALITICA/ LAB. CHIM. ANALITICA A	ARANEO PELLICCIARI	CIMA CIMA
F12004	1	04	FISICA GENERALE (1° corso)	SPINOLO	FIS
F12005	1	05	ISTITUZIONI DI MATEMATICA (2° corso)	TRAVAGLINI	MAT
F12006	2	06	FISICA GENERALE (2° corso)/ LAB. FISICA GENERALE	ZUFFI MERONI	FIS FIS
F12007	2	07	CALCOLO NUMERICO E PROGRAMMAZ.	CAZZANIGA	MAT
F12008	2	08	CHIMICA ORGANICA (1° corso)/ LAB. CHIMICA ORGANICA (1° corso) A e B	CINQUINI -	COI
F12009	2	09	CHIMICA FISICA (1° corso)	FIORI	CFE
F12010	2	10	CHIMICA ANALITICA STRUMENTALE/ LAB. CHIM. ANALITICA STRUMEN. A	GULLOTTI -	CIMA
F12011	2	11	CHIMICA BIOLOGICA	ZIPPEL	BIOD
F12012	3	12	CHIMICA FISICA (2° corso) LAB. CHIMICA FISICA A e B	CARNITI SELLI RONDININI	CFE CFE CFE
F12013	3	13	CHIMICA ORGANICA (2° corso)/ LAB. CHIMICA ORGANICA (2° corso) A e B	MAIORANA -	COI
F12014	3	14	CHIMICA FISICA INDUSTRIALE	FORNI	CFE
F12073	3	15	CHIMICA INDUSTRIALE I/	FAITA	CFE
F12074	3	16	LAB. CHIMICA INDUSTRIALE I	DI SILVESTRO	COI
F12017	3	17	CHIMICA INORGANICA/ LAB. CHIMICA INORGANICA A	R. UGO -	CIMA
F12066	3	17.bis	PROVA CONOSCENZA LINGUA INGLESE	FERRUTI	COI
<b>Biennio di Applicazione</b> Corsi fondamentali					
F12018	4	18	CHIMICA INDUSTRIALE II/ LAB. CHIMICA INDUSTRIALE II	LANDINI ANNUNZIATA	COI COI
F12016	4	18.bis	PROCESSI E IMP.TI IND. CHIM. I/ LAB. PROC. IMP.TI E IND. CHIMICI A	RAGAINI -	CFE
F12019	5	19	PROCESSI E IMP.TI IND. CHIMICI II	P. BELTRAME	CFE
Corsi obbligatori e opzionali d'indirizzo					
F12020	4	20	CHIMICA FISICA MATERIALI/ LAB. CHIMICA FISICA MATERIALI	MARI -	DSM
F12021	4	21	CHIMICA ORGANICA INDUSTRIALE	LANDINI	COI
F12022	4	22	CHIM. FERMENT. E MICROBIOL. IND.LE/ LAB. CHIM. FERM. E MICROBIOL. IND.LE	RANZI RANZI	BIOD BIOD
F12023	4	23	ELETTROCHIMICA/ LAB. ELETTROCHIMICA	TRASATTI PR. MUSSINI	CFE CFE
F12024	4	24	CHIMICA MACROMOLECOLE/ LAB. MACROMOLECOLE	FERRUTI FERRUTI	COI COI
F12025	4	25	CHIMICA ORGANICA APPLICATA/ LAB. CHIMICA ORGANICA APPLICATA	MAIORANA LICANDRO	COI COI
F12026	4	26	CHIMICA SOST. ORG. NATURALI/ LAB. CHIM. SOST. ORG. NATURALI	MANITTO SPERANZA	COI COI
F12027	4	27	CHIMICA FISICA CATALISI/ LAB. CHIMICA FISICA CATALISI	FORNI FORNI	CFE CFE
F12028	4	28	CHIMICA FISICA MATERIALI	MARI	DSM
F12048	4	29	CHIM. FERMENT. E MICROBIOL. IND.LE	RANZI	COI
F11047	4	30	CHIMICA SOSTANZE ORGANICHE NAT.	MANITTO	COI
F12031	4	31	ELETTROCHIMICA	TRASATTI	CFE
F12032	4	32	CHIMICA DELLE MACROMOLECOLE	FERRUTI	COI



F12033	4	33 CHIMICA ORGANICA APPLICATA	MAIORANA	COI	
F12034	4	34 CHIMICA FISICA DELLA CATALISI	FORNI	CFE	
F12035	4	35 SCIENZA DEI METALLI	TRASATTI		CFE
F12036	0	36 Cristallografia	Non Attivato		
F12037	0	37 Sintesi e Tecniche Spec. Organiche	Non attivato		
F12038	4	38 CHIMICA ORGANICA III	LICANDRO	COI	
F12039	4	39 CHIMICA METALLORGANICA	PIZZOTTI		CIMA
F12040	4	40 CHIMICA DEI PROCESSI BIOTECNOL.	VALCAVI		COI
F12041	0	41 Misure Elettriche	Non Attivato		
F12042	5	42 CORROSIONE E PROTEZIONE MATERIALI METALLICI	MAZZA	CFE	
F12043	5	43 Chim. Analitica Dei Materiali	Non Attivato		
F12044	5	44 CHIMICA INORGANICA (DEI MATERIALI)	PRATI	CIMA	
F12045	0	45 Chimica Organica dei Materiali	Non Attivato		
F12046	0	46 Nessun Insegnamento codificato			
F12047	0	47 ELETTROCHIMICA (INDUSTRIALE)	RONDININI	CFE	
F12048	5	48 SINTESI E TECNICHE SPECIALI INORG.	BANDITELLI	CIMA	
F12049	4	49 CINETICA CHIMICA E DINAMICA MOLECOLARE	CARNITI	CFE	
F12050	4	50 BIOCHIMICA INDUSTRIALE	VANONI	BIOD	
F12051	0	51 Elettrochimica (Applicata)	Non Attivato		
F12052	0	52 Metallurgia Fisica	Non Attivato		
F12053	5	53 FOTOCHIMICA	SELLI	CFE	
F12054	5	54 METALLURGIA	SIVIERI	CFE	
F12070	4	55 CHIMICA DEI COMPOSTI ORGANOMETALLICI	DEL BUTTERO	COI	
F12071	4	56 CHIMICA FISICA DELLO STATO SOLIDO E DELLE SUPERFICI (PER LA CATALISI)	GERVASINI	CFE	
F12072	5	57 CHIMICA E TECNOLOGIA DEI POLIMERI	DI SILVESTRO	COI	

### DIPARTIMENTI

MAT	=	Matematica, via Saldini 50
FIS	=	Fisica, via Celoria 16
CIMA	=	Chimica Inorganica, Metallorganica e Analitica, via Venezian 21
CFE	=	Chimica Fisica ed Elettrochimica, via Venezian 21
COI	=	Chimica Organica e Industriale, via Venezian 21
BIODIP	=	Biodipartimenti, via Celoria 26
DSM	=	Scienze dei Materiali, via Emanuelli, 15 (Bicocca)
DSA	=	Scienze dell'Ambiente e del Territorio, via Emanuelli, 15 (Bicocca)

**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 (CFE)**

Via Golgi, 19

**Dipartimento di Chimica Inorganica, Metallorganica e Analitica (CIMA)**

Via Venezian, 21

**Dipartimento di Chimica Organica e Industriale (COI)**

Via Venezian, 21

**Dipartimento di Fisiologia e Biochimica Generali (BioDip)**

Via Celoria, 26

**Dipartimento di Matematica (MAT)**

Via Saldini, 50

**Dipartimento di Fisica (FIS)**

Via Celoria, 16

**Dipartimento di Scienze della Terra, Sezione di Mineralogia, Petrografia e Geochimica (DST)**

Via Botticelli, 23

**Dipartimento di Chimica Strutturale e Stereochimica Inorganica (CSSI)**

Via Venezian, 21

**Dipartimento Scienze Ambientali (DSA) - Polo Bicocca**

Via Emanuelli, 15

**Dipartimento Scienze dei Materiali (DSM) - Polo Bicocca**

Via Emanuelli, 15

## **ELENCO DEGLI ARGOMENTI DI TESI DISPONIBILI**

### **Avvertenze**

Gli argomenti di Tesi qui riportati si intendono adatti per studenti di Chimica e Chimica Industriale, a meno che non sia chiaramente espressa l' idoneità per studenti dell' uno o dell' altro Corso di Laurea sopra nominati. Gli argomenti di Tesi qui riportati sono quelli pervenuti a questa Segreteria e hanno valore di prima informazione.

LA SEGRETERIA DIDATTICA

## DIP. CHIMICA STRUTTURALE E STEREOCHIMICA INORGANICA

1) L. Carlucci, G. Ciani, F. Demartin, M. Manassero, N. Masciocchi, M. Moret, D. M. Proserpio, M. Sansoni, A. Sironi

### **Studio strutturale di composti organometallici e a grappolo metallico. Relazione tra struttura e proprietà'.**

E' una tematica che viene svolta in stretta collaborazione con gruppi di ricerca esterni al dipartimento, che curano la sintesi, la caratterizzazione spettroscopica e la reattività delle specie di cui noi determiniamo ed interpretiamo la struttura cristallina e molecolare.

Composti a grappolo metallico. Nel corso del 1999 la ricerca sarà rivolta alla caratterizzazione cristallografica e allo studio della stereochimica dei cluster carbonilici omo ed eterometallici. Essa è finalizzata all'individuazione di specie con nuove ed inaspettate stereogeometrie, dei leganti e delle gabbie metalliche, nella prospettiva di una razionalizzazione delle differenze tra cluster etero- ed omo-metallici. In particolare saranno oggetto di analisi:

- i) i fattori che determinano la stabilità relativa dei differenti tipi di scheletri metallici;
- ii) la preferenza di sito, cioè lo studio di stereoisomeri che differiscano nella sola distribuzione dei metalli sui diversi centri;
- iii) i fattori che determinano la stabilità relativa delle diverse stereogeometrie dei leganti;
- iv) le possibili correlazioni tra la struttura allo stato solido e le proprietà spettroscopiche in soluzione o in fase condensata;
- v) gli effetti dovuti alla presenza di leganti diversi dal carbonile (idruri, alogenuri, fosfine);
- vi) gli effetti dovuti alla presenza di elementi tipici (C, N, P, S ecc.) in posizione interstiziale o semi-interstiziale.

In particolare progettiamo di studiare:

- a) cluster di nuclearità medio bassa (4-6 atomi metallici) eterobimetallici: Rh/Ru, Rh/Ir, Re/Pt e Re/Ir, Ni/Rh;
- b) cluster misti Fe/Mn e Fe/Mo con azoto in posizione interstiziale;
- c) cluster di platino a nuclearità media e medio-bassa stabilizzati da elementi di post-transizione come stagno e germanio;
- d) cluster di Ni ad elevata nuclearità contenenti eteroatomi interstiziali.

Composti mononucleari. Saranno studiate le strutture di complessi di platino, palladio ed oro con 2,2'-bipiridili sostituiti comprendenti in molti casi la metallazione di atomi di carbonio alchilici o arilici con la formazione di metallacikli. Si indagheranno infine anche complessi di Au(I) con leganti di interesse farmacologico.

2) P. L. Bellon, V. Scatturin, S. Lanzavecchia

### **Tomografia elettronica - Tomografia a raggi X.**

Nel corso dell'anno 1999 si intende proseguire lo sviluppo di metodi tomografici per la microscopia elettronica. In particolare verranno studiati metodi tomografici a partire da proiezioni con orientazioni casuali. A questo proposito verranno studiati nuovi algoritmi e metodi sperimentali per determinare l'orientazione delle proiezioni.

I metodi così sviluppati verranno impiegati nella determinazione di strutture proteiche quaternarie quali tossine di rilevante interesse biologico e clinico e pigmenti respiratori di organismi inferiori.

Verranno inoltre continuate ed approfondite tematiche di ricerca già intraprese, quali:

1. lo studio di particolari aspetti nei metodi diretti di Fourier per la tomografia elettronica a raggi X;
2. lo studio di strutture citoscheletriche di organismi inferiori, con particolare riguardo ai microtubuli, mediante tomografia elettronica.

3) N. Masciocchi, M. Moret, A. Sironi

### **Studio strutturale di fasi inorganiche e di materiali mediante diffrazione di polveri.**

Si intende perseguire la caratterizzazione strutturale di composti inorganici e di coordinazione che per loro natura non danno cristalli singoli, per esempio perchè:

i) termicamente instabili (e quindi non possono essere cristallizzati dal fuso) o praticamente insolubili (e quindi non ricristalizzabili dalle loro soluzioni), ii) intrinsecamente geminati o iii) prodotti transienti di reazioni allo stato solido.

In particolare, alla classe i) appartengono tipicamente i prodotti polimerici ed oligomerici di metalli con leganti azotati anionici, quali pirazolati, imidazolati e pirimidinolati, che danno luogo ad una varietà di modi di coordinazione e a diverse strutture sovramolecolari. Si prevede di estendere la metodologia messa finora a punto su questi sistemi per lo studio di derivati carbonilici neutri di metalli del VII e VIII gruppo.

Composti carbonilici neutri, quali  $\text{Ir}_4(\text{CO})_{12}$ ,  $\text{Fe}_3(\text{CO})_{12}$ ,  $\text{H}_3\text{Re}_3(\text{CO})_{12}$  e  $\text{Rh}_4(\text{CO})_{12}$ , sono stati interpretati, in passato, come cristalli con disordine statico, dinamico o geminazione (classe ii). Si intende verificare tale comportamento e rivedere tale categoria a partire da materiale policristallino.

La reazione di piccole molecole, liquide o gassose, con materiali policristallini può indurre una reattività, determinata dalla cavità di reazione, differente che in soluzione. Si tenterà di esplorare la stabilizzazione di fasi intermedie, labili in soluzione, ma sufficientemente stabili allo stato solido (classe iii), che mostrino effetti di addizione o intrappolamento dei gas (liquidi) da parte dei precursori. Al riguardo, si studieranno le reazioni di CO ed eterocumuleni quali CO<sub>2</sub>, COS e CS<sub>2</sub>.

4) M. Moret, A. Sironi

**Microscopie non convenzionali ad effetto tunnel (STM) e a forza atomica (AFM).**

Le applicazioni di queste tecniche allo studio dei difetti e dei fenomeni di geminazione presenti nei cristalli di composti inorganici e metallorganici, attualmente condotte in aria, verranno estese ad ambienti controllati utilizzando una cella per fluidi. Nello specifico verranno condotti studi AFM su cristalli immersi in vari solventi (acqua, alcani, alcoli, chetoni) al fine di: i) verificare la possibilità di ridurre l'entità delle forze di contatto e quindi di migliorare la risoluzione laterale nel caso di immagini a risoluzione atomica (cfr. simulazione immagini AFM) e ii) studiare in tempo reale ed in situ i fenomeni di crescita/dissoluzione dei cristalli immersi in opportuno solvente, eventualmente in presenza di additivi selettivamente adsorbiti su alcune delle facce dei cristalli.

A tale scopo verranno studiate modifiche della cella AFM per fluidi che consentano di lavorare in presenza di solventi non acquosi, e quindi potenzialmente aggressivi, eventualmente con flusso controllato del solvente o della soluzione contenente additivi e/o soluti.

Con riferimento al precedente punto i) verranno sviluppati modelli di meccanica molecolare per descrivere l'interazione superficie del campione/sonda AFM, atti a simulare le immagini AFM da confrontare con le immagini sperimentali ed i modelli strutturali delle superficie ricavate dai dati strutturali di bulk.

5) F. Demartin, M. Moret, D.M. Proserpio

**Caratterizzazione cristallografica, strutturale ed analitica di fasi cristalline inorganiche naturali e di sintesi**

Verranno utilizzate, per stabilire la cristallografia di alcuni gruppi di composti inorganici di sintesi o naturali, tecniche di caratterizzazione strutturale mediante diffrazione di raggi X su cristallo singolo accoppiate a determinazioni analitiche mediante microsonda elettronica.

Lo studio dei composti di sintesi sarà rivolto alla determinazione strutturale di tellururi ternari e quaternari sintetizzati con tecniche di sali fusi a bassa temperatura (300-400°C) o idrotermale.

6) P. Macchi, D. M. Proserpio, A. Sironi

**Determinazione sperimentale di densità elettronica accurata in composti organometallici.**

Nel corso dei recenti studi si è dimostrata la possibilità di impiegare diffrattometri ad area detector per determinazioni

di densità elettronica accurata. Gli studi nell'ambito di questa tematica sono volti allo studio di composti organometallici. In particolare, si intende proseguire l'analisi del legame in composti con leganti coordinati n2 ad un metallo di transizione (Ni(COD)2, ((t-But)2Pz)2TiCl2) ed intraprendere una investigazione di alcuni composti contenenti legame tra atomi di metallo (dimeri con o senza supporto di leganti a ponte, Co2(CO)6(AsPh3)2, e composti polinucleari a bassa nuclearità).

#### **7) Modellazione di sistemi molecolari mediante potenziali empirici.**

##### *a) Studio del riconoscimento molecolare. (A. Gavezzotti)*

Calcoli statici di costruzione e ottimizzazione di strutture cristalline a partire da modelli molecolari; generazione e previsione della struttura cristallina;

simulazione dinamica di cristalli;

simulazione dinamica del riconoscimento molecolare in soluzione, per quanto riguarda gli aspetti strutturali, termodinamici e cinetici dei processi di dissoluzione, smiscelamento, coagulazione e nucleazione cristallina.

##### *b) Razionalizzazione di processi chimici in soluzione e allo stato solido (A. Sironi)*

Analisi conformazionale di specie molecolari organometalliche e interpretazione degli spettri NMR a temperatura variabile.

caratterizzazione dei moti molecolari in solidi di molecole flessibili.

#### **8) L. Carlucci, G. Ciani, D. M. Proserpio**

##### **Sintesi e caratterizzazione strutturale di nuove fasi inorganiche.**

Questa linea tematica è rivolta alla preparazione, alla caratterizzazione spettroscopica, alle analisi termiche e alla determinazione strutturale mediante diffrazione di raggi X su cristallo singolo di nuovi polimeri 2D o 3D di coordinazione. Le strategie di sintesi sono mirate all'ottenimento di fasi cristalline con caratteristiche strutturali desiderate (crystal engineering); tali specie polimeriche risultano di notevole interesse sia dal punto di vista strettamente strutturale e topologico, per la varietà di nuovi tipi di reticoli che si vanno scoprendo, sia per le loro potenziali proprietà chimico-fisiche, quali conducibilità elettrica, comportamento magnetico, nanoporosità, e per il loro potenziale utilizzo nello scambio ionico e in catalisi.

Proseguiranno le nostre recenti ricerche, che hanno portato alla caratterizzazione di nuove specie polimeriche di Ag(I) con leganti bidentati e polidentati donatori all'azoto, quali il 4,4'-bipiridile, la 4-cianopiridina, la esametilentetrammina, il TCNE e altri leganti bidentati; tali specie hanno mostrato la versatilità dei sali di argento, con anioni non coordinanti, nel formare networks aperti (eventualmente interpenetrati) aventi topologie mai osservate in precedenza o molto rare, quali reticoli super-diamante interpenetrati, e reticoli correlati alle topologie del  $\alpha$ -ThSi2 e del  $\alpha$ -polonio.

Verranno utilizzati sia sali di argento con anioni non coordinanti (triflato, tosilato, ClO4-, BF4-, PF6-, SbF6- etc.) che sali di Cu(I), Cu(II), Zn(II) e Cd(II), e si utilizzeranno basi aromatiche bidentate donatrici all'azoto, sia rigide che flessibili e di lunghezza differenziata, in modo da poter realizzare reticoli con cavità di dimensioni diverse. Si cercherà anche di progettare e di sintetizzare nuove classi di basi, dalle geometrie opportune per la realizzazione di polimeri di topologia desiderata.

Si approfondirà in tale contesto il ruolo del solvente e dell'ingombro sterico dei leganti nella formazione dei polimeri e si cercherà di razionalizzare quali fattori favoriscono e quali sfavoriscono la interpenetrazione dei reticoli.

Si darà spazio alle indagini sulle proprietà di tali composti di scambiare ioni, di includere molecole di solvente o di ospitare piccole molecole organiche. Verranno condotte analisi termiche (DSC e TGA) per studiare la stabilità di tali reticoli e le loro trasformazioni.

Verrà affrontato infine uno studio ampio e sistematico sulle proprietà strutturali, termiche e di reattività di polimeri 1D di argento con basi bidentate N-donatrici di diversa lunghezza, rigidità e ingombro sterico.

**DIPARTIMENTO DI CHIMICA INORGANICA E METALLORGANICA**

<i>Proponente</i>	<i>Argomento N°</i>
Prof.ssa ANGOLETTA	1
Prof. ARANEO	2-3
Dr.ssa BANDINI	4
Prof. BANDITELLI	4-24
Prof.ssa BERINGHELLI	10
Prof. CARIATI	5
Prof. CENINI	6-7
Prof. CERIOTTI	8
Prof. CESAROTTI	9
Prof. D'ALFONSO	10
Dr. DELLA PERGOLA	8
Dr.ssa D.ROBERTO	24
Prof. DOSSI	11-12-21-23
Prof. FANTUCCI	13
Prof.ssa FRENI	14
Dr. FUMAGALLI	18
Prof. FUSI	12-17-18
Prof. GARLASCHELLI	8-17-18
Prof. GULLOTTI	16
Dr.ssa GRASSI	15
Prof.ssa M.C. MALATESTA	17
Prof. MARTINENGO	18
Prof. PASINI	19
Prof. PIZZOTTI	6-24
Prof.ssa PORTA	7-20
Dr.ssa PRATI	22
Dr. PSARO	11-21-24
Dr. F. RAGAINI	6
Prof. ROSSI	22
Dr. TOLLARI	6-7-11
Prof. R. UGO	11-21-24
Prof. G.M. ZANDERIGHI	12-21

## **1. PROF.SSA ANGOLETTA MARIA**

### *Argomenti di tesi:*

- 1) Composti di acetilene di Iridio con acetileni composti.
- 2) Reattività degli idruri dei metalli di transizione con DiAzoacetato di Etile.

**Note:** Solo per Chimici.

## **2. PROF. ARANEO ANTONIO**

### *Argomento di tesi:*

- 1) Recupero di metalli da fanghi industriali. Ricerche sulla depurazione di scarichi industriali.

## **3. 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:

## **4. 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.
- 2) Sintesi e caratterizzazione di complessi con fosfine mono e bidentate con particolari caratteristiche di asimmetria e loro potenzialità in catalisi.
- 3) Complessi di metalli del gruppo del platino con nuovi leganti ibridi al fosforo e all'azoto; caratterizzazione in soluzione, allo stato solido e in fase vapore.
- 4) Impiego della spettrometria di massa nello studio di composti di coordinazione; relazione tra la reattività di composti in vapore e in fase condensata.

## **5. PROF. CARIATI FRANCESCO**

### *Argomenti di tesi:*

- 1) Studio spettroscopico delle proprietà di nuovi materiali inorganici mediante IR, Raman, EPR, UV-visibile e Mössbauer.
- 2) Applicazione di tecniche spettroscopiche e analitiche nello studio di agenti inquinanti dell'atmosfera e delle acque.
- 3) Applicazione di tecniche spettroscopiche analitiche nel campo della conservazione e recupero di monumenti ed opere d'arte.
- 4) Studio spettroscopico di equilibri in soluzione di complessi di metalli di transizione.

## **6. PROF. CENINI SERGIO, PROF.SSA PIZZOTTI MADDALENA, DR. FABIO RAGAINI, 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, carbammati, 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) Reazioni di trasferimento di residui nitrenici su idrocarburi insaturi catalizzate da metallo-porfirine.
- 5) Reazioni di metallazione e di funzionalizzazione di derivati eterociclici.

**7. PROF. CENINI SERGIO, PROF.SSA PORTA FRANCESCA, DR. STEFANO TOLLARI**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Chimica organometallica: ossidazioni stechiometriche e catalitiche di composti organici con complessi di metalli di transizione.
- 2) Preparazione di micro particelle metalliche: reattività e catalisi su substrati organici.
- 3) Nuovi materiali: preparazione di particelle colloidali di ossidi misti a base di metalli di transizione e terre rare.

**8. PROF. CERIOTTI ALESSANDRO, DR. DELLA PERGOLA ROBERTO, PROF. GARLASCHELLI LUIGI**

*Argomenti di tesi:*

Composti polinucleari metallici, stabilizzati da leganti carbonilici

- 1) Sintesi di clusters metallo-carbonilici omo ed eterometallici di elementi dell'VIII gruppo.
- 2) Reattività dello scheletro metallico e dei gruppi leganti nei clusters metallo-carbonilici.
- 3) Reazione di piccole molecole organiche con clusters metallo-carbonilici attivati chimicamente o termicamente.
- 4) Attivazione del monossido di carbonio e funzionalizzazione di substrati organici mediante l'uso di clusters metallo-carbonilici.
- 5) Impiego di clusters e/o composti mononucleari metallo-carbonilici in catalisi omogenea.

**Note:** Le tesi prevedono l'impiego di apparecchiature atte alla manipolazione in atmosfera inerte nel periodo di tesi lo studente acquista familiarità con le principali tecniche di analisi spettroscopica finalizzata alla caratterizzazione strutturale di composti metallorganici (I.R., N.M.R. multinucleare, massa, microscopia elettronica).

**9. PROF. CESAROTTI EDOARDO**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Chimica organometallica: sintesi, caratterizzazione e reattività di complessi di metalli di transizione chirali al centro metallico.
- 2) Chimica organometallica: sintesi e caratterizzazione di nuovi materiali con proprietà mesomorfe; preparazione e studio delle proprietà di cristalli liquidi chirali, in particolare di cristalli liquidi ferroelettrici.
- 3) Catalisi omogenea e sintesi di "fine chemicals": sintesi di prodotti ad attività biologica (PAF, - e -bloccanti, ipocolesterolemici, zuccheri) tramite riduzioni stereocontrollate o creazione di stereocentri per formazione di legami C-C catalizzate da complessi di metalli di transizione con leganti chirali.

**10. PROF. D'ALFONSO GIUSEPPE, PROF.SSA BERINGHELLI TIZIANA**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Studio della reattività ed indagine sui meccanismi di reazione in composti organometallici mono e polinucleari.
- 2) Preparazione di nuovi catalizzatori a partire da cluster omo ed eterometallici eterogeneizzati su supporti inorganici.
- 3) Studio delle proprietà strutturali e dinamiche di composti organometallici tramite spettroscopia NMR.

La parte di laboratorio, che generalmente comporta l'apprendimento di tecniche analitiche e/o preparative quali la cromatografia su strato sottile, la gascromatografia, la spettrofotometria ad infrarosso, la conduttimetria, l'interpretazione di spettri NMR 1D, potrà anche essere affiancata, a seconda degli interessi dello studente, con una parte di elaborazione numerica dei risultati al computer (modelli cinetici) o con l'apprendimento di tecniche avanzate di spettroscopia NMR.

#### **11. PROF. DOSSI CARLO, PROF. FUSI ACHILLE, DR. PSARO RINALDO, PROF. UGO RENATO**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Catalisi eterogenea con cluster carbonilici supportati su ossidi inorganici.
- 2) Metodologie innovative di preparazione di catalizzatori metallici su ossidi, zeoliti ed altri materiali.
- 3) Studio di reazioni catalitiche in fase eterogenea di interesse industriale (dealogenazione di CFC, idrogenazioni selettive, ossidazione parziale di idrocarburi).
- 4) Abbattimento di NO<sub>x</sub> con catalizzatori eterogenei.

#### **12. PROF. DOSSI CARLO, PROF. ZANDERIGHI GIOVANNI MARIA, PROF. FUSI ACHILLE**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Sviluppo di metodologie analitiche strumentali avanzate applicate alla caratterizzazione di catalizzatori metallici e alla determinazione di inquinanti in ambiente.
- 2) Determinazione analitica di metalli pesanti in tracce.

#### **13. PROF. FANTUCCI PIERCARLO,**

*Argomenti di tesi:*

- Studio teorico di molecole con proprietà ottiche non lineari. Lo studio teorico mira a formulare regole generali per stabilire quali categorie di composti possono avere applicazioni nel campo dell'ottica non lineare ancora prima che il lavoro sintetico e di misura sperimentale delle proprietà abbia luogo.
- Meccanica e dinamica molecolare di emoproteine. In particolare viene studiato il meccanismo di interazione di substrati organici e inorganici con perossidasi vegetali e animali.
- Meccanica e dinamica molecolare di lipasi. In particolare viene studiato il meccanismo di interazione di substrati organici con lipasi batteriche.
- Sviluppo di metodologie e programmi adatti allo studio quantitativo delle interazioni intermolecolari (docking).
- Studio quantomeccanico del meccanismo di reazione e della struttura elettronica di complessi modello del sito attivo di metallo enzimi.

**Note:** Le tesi proposte consistono nell'utilizzo di programmi di calcolo quantomeccanico e sono consigliabili a studenti interessati all'uso del computer in chimica.

#### **14. PROF.SSA FRENI MARIA**

*Argomento di tesi:*

- 1) Comportamento dell'acido ascorbico con complessi di rame e zinco (solo per Chimici).

– la verifica scientifica dei metodi individuali

– la verifica tecnica al fine di definire la loro fattibilità attraverso costi-benefici.

#### 15. DR.SSA MARIA GRASSI

· **Nmr in chimica dell'ambiente.Studio dell'interazione metallo Pesante-Humus.**

Il lavoro di tesi prevede la preparazione di addotti metallo pesante-humus ( $M = Cd^{2+}, Pb^{2+}, Hg^{2+}$ ) e la sintesi di opportune molecole modello del tipo  $ML_n$  (dove L = legante contenenti gruppi donatori all'ossigeno, azoto e zolfo). Tali sistemi saranno quindi caratterizzati sia in solido che in soluzione principalmente tramite spettroscopia NMR con osservazione diretta dei nuclei  $^{207}Pb$ ,  $^{113}Cd$ ,  $^{199}Hg$  (oltre ai tradizionali  $^{13}C$ ,  $^1H$  e  $^2H$ ) e moderne tecniche analitiche quali: la spettrometria di massa MALDI-TAF, la diffrazione a raggi X, le spettroscopie IR, UV-Vis, AA, ICP.

· **Adsorbimento, trasporto e immobilizzazione di metalli pesanti nei terreni e nelle acque.**

La tesi si propone di monitorare la capacità sequestrante dell'humus (nelle sue frazioni solubili ed insolubili in acqua) rispetto a inquinanti metallici.

Diversi acidi umici verranno caratterizzati per quanto concerne composizione centesimale, solubilità in  $H_2O$  ed acidità. Si valuterà quindi la loro capacità sequestrante acquosa ed in sospensione rispetto a ioni inquinanti ( $Pb^{2+}, Pb^{2+}, Hg^{2+}$ ) al variare del pH, della forza ionica della soluzione, del tipo e della concentrazione degli ioni metallici interessati.

Per lo studio del sistema si utilizzeranno principalmente la polarografia, le spettroscopie: AA, ICP, NMR multinucleare e tecniche potenziometriche e conduttimetriche.

#### 16. 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 B6.
- 4) Caratterizzazione e attività di metallo-proteine naturali contenenti Cu e Fe.

#### 17. PROF.SSA MALATESTA MARIA CARLOTTA, PROF. GARLASCHELLI LUIGI

*Argomenti di tesi:*

Reazione degli alogeni-carbonili dei metalli del VIII gruppo con acetileni disostituiti.

- 1) Sintesi e reattività di anelli pentaatomici insaturi contenenti Pt come intermedi di processi catalitici.
- 2) Studio del meccanismo di inserzione del triplo legame acetilenico nel legame metallo-alogeno e/o metallo-carbonio.

**Note:** Verranno utilizzate per lo studio delle reazioni e per la caratterizzazione dei complessi isolati: la spettroscopia I.R., la spettrometria N.M.R. multinucleare ( $^{13}C$ ,  $^{31}P$ ,  $^{195}Pt$ ) e la spettrometria di massa.

#### 18. PROF. MARTINENGO SECONDO, DR. FUMAGALLI ALESSANDRO, PROF. GARLASCHELLI LUIGI

*Argomenti di tesi:*

Composti organometallici nella sintesi

- 1) Sintesi e caratterizzazione di carbonili polinucleari (a "cluster") omo o eterometallici dei metalli di transizione, con o senza eteroatomi interstiziali.
- 2) Reazione dell'ossido di carbonio catalizzata da carbonil-anioni dei metalli dell'ottavo gruppo.
- 3) Sintesi dei clusters ad alta nuclearità e studio delle loro relazioni con le fasi dello stato solido.

**Note:** Durante il periodo di tesi lo studente apprenderà sia le tecniche di sintesi e di manipolazione in atmosfera inerte di composti sensibili all'aria, che quelle atte alla loro caratterizzazione, come la spettroscopia I.R. ed N.M.R. multinucleare. Il terzo argomento di tesi dovrebbe essere svolto in collaborazione con un docente dell'Istituto di Chimica Strumentistica Inorganica, e prevede l'acquisizione di tecniche di diffrazione a raggi X di polveri.

#### 19. PROF. PASINI ALESSANDRO

*Argomenti di tesi:*

- 1) Chemioterapici inorganici. Analoghi del cisplatino a bassa tossicità. Studio modellistico del meccanismo d'azione, dell'uptake cellulare e della biodistribuzione.
- 2) Chemioterapici inorganici. Studio modellistico della tossicità e della detossificazione di metalli pesanti, come Pt, Cd e Hg. Proprietà e reattività dei legami tra metallo e zolfo e altri elementi del gruppo 16. Reattività dei leganti solforati.
- 3) Complessi metallici in geometrie distorte. Studio del rapporto tra la geometria del legante e la geometria di coordinazione di ioni metallici di transizione e non. Influenza della geometria di coordinazione sulle proprietà spettromagnetiche e sulla reattività del centro metallico e del legante.

**20. PORTA FRANCESCA**

*Argomenti di tesi:*

- 1) *Chimica organometallica e catalisi:* reazioni catalitiche di ossidazione di composti organici in presenza di complessi di metalli di transizione.
- 2) *Catalisi:* preparazione di nano-particelle metalliche di palladio e rodio e studio della loro reattività catalitica in presenza di substrati organici.
- 3) *Nuovi materiali:* preparazione di particelle colloidali e microemulsioni metalliche.  
Design e sintesi di composti inorganici ed organometallici aventi reticoli tridimensionali estesi con particolari proprietà magnetiche.

**21. DR. PSARO RINALDO, PROF. UGO RENATO, PROF. ZANDERIGHI GIAN MARIA, PROF. DOSSI CARLO**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Abbattimento di NO<sub>x</sub> con catalizzatori eterogenei.
- 2) Separazione e recupero di metalli nobili da soluzioni mediante carbonilazione (per es. da catalizzatori esausti).

**22. PROF. ROSSI MICHELE, DR.SSA PRATI LAURA**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Preparazione e test di valutazione di catalizzatori eterogenei per reazione di applicazione industriale.
- 2) Catalisi ambientale: metodologie innovative per la gestione di sottoprodotti e residui industriali.
- 3) Attivazione dell'ossigeno molecolare con catalizzatori eterogenei per nuove metodologie di sintesi.

**23. PROF. UGO RENATO, DR. PSARO RINALDO, PROF. DOSSI CARLO, PROF. FUSI ACHILLE**

*Argomenti di tesi:*

- Catalisi eterogenea con clusters carbonilici metallici supportati su ossidi.
- Metodologie innovative di preparazione di catalizzatori metallici su ossidi, zeoliti e altri materiali.

**24. PROF. UGO RENATO, PROF. BANDITELLI GUIDO, PROF.SSA PIZZOTTI MADDALENA, DR. PSARO RINALDO, DR.SSA ROBERTO DOMINIQUE**

*Argomenti di tesi:*

- 1) *Sintesi organometallica mediata dalla superficie della silice.* Si indaga l'uso della silice come mezzo di reazione nuovo e inusuale per la preparazione di vari complessi organometallici, allo scopo di ottenere sintesi più convenienti rispetto alle convenzionali sintesi in soluzione (per esempio, condizioni di reazione più blande, selettività e rese più elevate).
- 2) *Chimica organometallica di superficie di clusters carbonilici supportati su ossidi inorganici.* Si studia la reattività di vari clusters carbonilici supportati su ossidi inorganici quali la magnesite e la silice. Inoltre si cerca di chiarire i

fattori che regolano la chimica organometallica coinvolta nelle sintesi mediate dalla superficie di vari clusters carbonilici.

- 3) *Sintesi e caratterizzazione di complessi con gruppi idrossilici o silanolicci come composti modello di specie organometalliche di superficie.* Si studia la sintesi, la caratterizzazione e la reattività di composti organometallici come modelli di specie supportate sulla superficie della silice. Questi complessi modello permettono di interpretare meglio la chimica organometallica di superficie.
- 4) *Composti organometallici e complessi porfirinici come materiali con proprietà ottiche non lineari.* Si studia il design molecolare, la sintesi e la caratterizzazione di composti organometallici e complessi porfirinici per l'ottenimento di materiali con proprietà ottiche non lineari del secondo ordine.

**Note:** Durante il periodo di tesi lo studente apprenderà sia le tecniche di sintesi e purificazione di composti organometallici che quelle atte alla loro caratterizzazione, come la spettroscopia infrarossa, la spettrometria di massa e NMR. Nel caso di argomenti specialistici come per esempio le proprietà ottiche non lineari lo studente apprenderà l'uso di altre tecniche chimico-fisiche specifiche (e.g. Raman, UV-visibile, momenti di dipolo, etc.).

**DIPARTIMENTO DI CHIMICA FISICA ED ELETTROCHIMICA**

<u>Proponente</u>	<u>Argomento N°</u>
Prof.ssa ARDIZZONE	1
Prof. BELLOBONO	2
Prof. BELTRAME Paolo	3
Dr.ssa C.L. BIANCHI	15
Prof. CARNITI	4
Prof. DESTRO	5
Prof. FIORI	6
Prof. FORMARO	7
Prof. FORNI	8
Prof. GIANINETTI	14
Dr. GIANNANTONIO	15
Dr.ssa GERVASINI	15
Prof. LONGHI	9
Prof. MAZZA	10
Prof. MOROSI	11
Prof. MUSSINI	12
Dr.ssa P.R. MUSSINI	12-16
Prof. OLIVA	13
Prof. RAIMONDI	14
Prof. RAGAINI	15
Prof.ssa RONDININI	16
Dr.ssa SELLI	17
Dr. M. SIRONI	14
Prof. SIVIERI	18
Prof. TANTARDINI	19
Prof. TRASATTI	20
Dr.ssa VANDONI	14

## 1. PROF.SSA ARDIZZONE SILVIA

### *Argomenti di tesi:*

- 1) Preparazione con tecniche tradizionali e/o sol-gel di solidi in stato di elevata suddivisione per impieghi ceramici e catalitici. Caratterizzazione dei parametri chimico-fisici massivi, superficiali, morfologici, interfacciali ed elettrochimici delle polveri.
- 2) Termodinamica e cinetica dell'adsorbimento di tensioattivi e coloranti (ionici e non) su solidi dispersi in sospensione. Ricaduta su processi di: stabilità di sospensioni colloidali, bonifica di terreni ecc.
- 3) Studio della modellistica relativa ad interfasi elettrificate e relazioni tra parametri elettrici, di superficie (UHV) o da solvente non acquoso per la stessa fase.

## 2. PROF. BELLOBONO IGNAZIO RENATO

### *Argomenti di tesi:*

#### *1) Chimica fisica ambientale*

*1a)* Interazione di microinquinanti di origine antropica e industriale (radionuclidi o metalli pesanti) con materiali organici ed inorganici (es.: ossidi naturali) dei suoli e delle acque (in collaborazione con Institute of Environment, JRC/EU, Ispra (Va)) e modelli matematici relativi.

*1b)* Modelli matematici e cinetici relativi a produzione di microinquinanti nei processi di combustione (SO<sub>x</sub>, NO<sub>x</sub>...)(in collaborazione con ABB Ricerche).

*1c)* Metodologie innovative di denitrificazione e desolfurazione dei fumi di combustione di centrali termoelettriche mediante processi a membrana.

*1d)* Interazione fra rappresentazione teorica e approccio sperimentale nella formulazione di modelli matematici per la valutazione di problematiche ambientali.

*1e)* Degradazione fotocatalizzata di acque contenenti microinquinanti organici tossici (cloroorganici, in particolare) (studi cinetici in impianto pilota).

#### *2) Fotochimica di polimeri* (in collaborazione con Prof. Cesare Oliva e Centro CNR/CSRSRC)

*2a)* Studi cinetici del fotoinnesto e della fotopolimerizzazione di monomeri acrilici ed allilici polifunzionali mediante tecniche ESR, ENDOR, ESCA.

*2b)* Influenza dei sistemi fotocatalitici nei processi di cui in *2a*).

*2c)* Indagini ESR sui radicali ·OH generati in membrane fotocatalitiche e sulla loro cinetica con substrati organici (applicazioni alla fotocatalisi ed allo studio *in vitro* di sistemi biochimici e biofisici antiossidanti).

#### *3) Membrane fotosintetiche reattive; separazioni e reazioni ad alta selettività*

*3a)* Proprietà termodinamiche e cinetiche di membrane fotosintetiche immobilizzanti sorbenti, reagenti, catalizzatori, fotocatalizzatori, biocatalizzatori.

*3b)* Reattori pilota nei processi fotocatalitici a membrana (depurazione di microinquinanti in fase liquida e gassosa, potabilizzazione di acque, produzione di acqua iperpura, riciclo integrale di acque reflue).

*3c)* Reattori biotecnologici a membrane fotoinnestate immobilizzanti biocatalizzatori.

*3d)* Processi De-NO<sub>x</sub> a membrana, nei fumi di centrale termoelettrica, compreso lo studio delle reazioni a valle (in collaborazione con ABB Ricerche).

*3e)* Processi De-SO<sub>x</sub> a membrana reattiva (in collaborazione con ABB Ricerche).

*3f)* Processi puliti (chimica verde) in chimica organica (es.: nitratura in membrana catalitica, con riciclo integrale del catalizzatore liquido immobilizzato) (in collaborazione con JRC/EU, Ispra (VA)).

#### *4) Radiochimica e chimica delle radiazioni* (in collaborazione con Prof. Mauro Bonardi, laboratorio di radiochimica, LASA, Dipartimento di Fisica)

*4a)* Metodiche radiochimiche e radioanalitiche per la determinazione di purezza di materiali per uso biomedico, e di materiali industriali, prodotti in ciclotrone nonché per la separazione selettiva di radionuclidi nel fuel reprocessing.

*4b)* Studi sperimentali e modellistici comparativi fra il comportamento di sistemi modello in chimica delle radiazioni ed in fotochimica, con particolare riguardo alla fotocatalisi in sistemi omogenei ed in sistemi eterogenei, di interesse naturale e di interesse industriale.

### 3. PROF. BELTRAME PAOLO

*Argomento di tesi:*

- 1) Studio di reazioni in fase liquido/solido, su catalizzatori acidi solidi.

**Nota:** Tesi adatte per studenti del C.L. in Chimica Industriale.

### 4. PROF. CARNITI PAOLO

*Argomenti di tesi:*

- 1) Cinetica dell'idrolisi acida di polisaccardi naturali con catalizzatori acidi solidi.
- 2) Cinetica della conversione catalitica dei carboidrati.
- 3) Cinetica della degradazione termica e catalitica di polimeri sintetici.

**Note:** Gli argomenti di tesi si inquadrano nelle problematiche dello sfruttamento di fonti energetiche rinnovabili e del recupero di materiali di scarto.

### 5. 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, trasformazione di fase).

### 6. PROF. FIORI GIORGIO

*Argomenti di tesi:*

- 1) Sintesi organica per via elettrochimica (solo per Chimici Industriali).

### 7. PROF. FORMARO LEONARDO

*Argomenti di tesi:*

- 1) Studio dei processi di formazione per precipitazione da soluzione di ossidi monodispersi di dimensioni colloidali.
- 2) Studio dei processi di adsorbimento da soluzioni acquose sulla superficie di ossidi.
- 3) Comportamento elettrochimico di ossidi in forma colloidale e di film sottili.

### 8. PROF. FORNI LUCIO

*Argomenti di tesi:*

Gli argomenti di tesi, preferibilmente per studenti del corso di laurea in *Chimica Industriale*, riguardano la **Catalisi Eterogenea**, nei suoi vari aspetti, con particolare riferimento alla applicazione a processi di interesse industriale. Pertanto lo studente può applicarsi a:

- preparazione, caratterizzazione e ottimizzazione della composizione del catalizzatore;
- studio cinetico e meccanicistico della reazione catalitica di interesse.

Scopo della tesi è determinare la dipendenza del comportamento del catalizzatore, in termini di attività, selettività e



durata nel tempo, dalle sue caratteristiche chimico-fisiche e dai parametri di reazione, con ricerca della eventuale presenza di effetti diffusionali, termici e/o di massa.

Le indagini presentemente attive riguardano:

- 1) zeoliti, eventualmente additivate, da impiegarsi per reazioni catalitiche acido-base
- 2) miscele di ossidi di metalli di transizione, di struttura perovskitica, da impiegarsi per la combustione senza fiamma del metano e per la decontaminazione dei gas di scarico, civili o industriali, da inquinanti come NO<sub>x</sub>, CO, HC
- 3) nuovi catalizzatori per la sintesi dell'ammoniaca
- 4) nuovi catalizzatori per la deidrogenazione dell'etilbenzene a stirene.

## **9. PROF. PAOLO LONGHI**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Termodinamica di, e processi di trasporto in, soluzioni elettrolitiche in solventi acquosi, non acquosi e misti.
- 2) Elettrodi ionoselettivi.
- 3) Trattamento elettrochimico di reflui.

## **10. PROF. MAZZA FRANCESCO**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Tensocorrosione ed infragilimento da idrogeno di leghe per scambio termico.
- 2) Monitoraggio dei processi di corrosione.
- 3) Comportamento alla corrosione di acciai inossidabili di nuova generazione.
- 4) Processi di innesco e sviluppo della corrosione localizzata.

## **11. PROF. MOROSI GABRIELE**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Sviluppi ed applicazioni dei metodi Monte Carlo Quantistici.
- 2) Studio di cluster di gas nobili con inclusione di molecole e ioni.

## **12. PROF. MUSSINI TORQUATO, DR.SSA MUSSINI PATRIZIA**

*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.

## **13. 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, 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

**14. PROF. RAIMONDI MARIO - PROF. ERMANNO GIANINETTI, DR. MAURIZIO SIRONI, DR.SSA IDA VANDONI**

Gli argomenti di Tesi proposti riguardano l'applicazione di metodi ab-initio ad importanti problematiche di interesse chimico-fisico e chimico-biologico.

All'interno del gruppo vengono inoltre sviluppati nuovi metodi di calcolo ab-initio provvedendo alla loro definizione teorica e alla successiva implementazione in algoritmi di calcolo.

Lo studente ha quindi la possibilità di acquisire una buona esperienza di chimica computazionale utilizzando alcuni fra i packages più comuni (Gaussian, Gamess) e una capacità di programmazione con il linguaggio Fortran.

*Argomenti di tesi:*

- Calcolo delle forze intermolecolari per sistemi a legame idrogeno e per molecole di interesse biologico.
- Studio delle superfici di energia potenziale per sistemi di Van der Waals con lo scopo ultimo di eseguire calcoli di scattering quantistico (in collaborazione con il Prof.F. Gianturco dell'Università di Roma).
- Sviluppo di algoritmi per il calcolo di forze intermolecolari esenti dal Basis Set Superposition Error al fine di generare potenziali da utilizzare per la simulazione di liquidi.
- Studio della struttura elettronica dei polimeri ed analisi della possibilità di costruire orbitali del polimero a partire da sub-unità.
- Calcolo delle proprietà ottiche non lineari per polimeri coniugati.
- Studio Valence Bond di reazioni chimiche.

**15. PROF. RAGAINI VITTORIO, DR. C.L. BIANCHI, DR. R. GIANNANTONIO, DR.SSA A. GERVASINI**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Caratterizzazione di catalizzatori metallici supportati mediante chemisorbimento, desorbimento termico in alto vuoto, spettroscopia fotoelettronica a raggi X.
- 2) Sonochimica.
- 3) Catalisi ambientale.
- 4) Reazioni e reattori per processi catalitici.

**16. PROF.SSA RONDININI SANDRA, DR.SSA PATRIZIA MUSSINI**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Caratterizzazione elettrochimica di membrane a scambio ionico, e loro applicazioni in processi di interesse industriale (preferenzialmente per Chimici Industriali).
- 2) Elettrosintesi organiche (per Chimici e Chimici Industriali).
- 3) Elettrodi metallo-idrogeno (per Chimici e Chimici Industriali).

**17. DR.SSA SELLI ELENA**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Caratterizzazione mediante tecniche EPR/ENDOR di radicali generati nella fotopolimerizzazione di monomeri multifunzionali e nell'irraggiamento di polimeri (in collaborazione con il prof. Cesare Oliva).
- 2) Interazioni all'interfaccia con ossidi, fotocatalisi e fotodegradazioni in sistemi acquatici naturali (in collaborazione con l'Istituto per l'Ambiente del Centro Comune di Ricerca della Comunità Europea di Ispra).

**18. 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.

#### **19. PROF. TANTARDINI GIAN FRANCO**

*Argomenti di Tesi*

- 1) Reazioni catalizzate da superfici metalliche: studio teorico dell'adsorbimento di fasci molecolari.
- 2) Dinamica quantistica con il metodo della propagazione del pacchetto d'onda.
- 3) Calcolo ab initio del potenziale di interazione tra molecole in fase gassosa e superfici metalliche di interesse catalitico.

#### **20. PROF. TRASATTI SERGIO**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Studio dell'interfase ossido/soluzione elettrolitica.
- 2) Caratterizzazione elettrochimica di materiali elettrodi per impieghi tecnologici.
- 3) Elettrocatalisi organica e inorganica.

**DIPARTIMENTO DI CHIMICA ORGANICA E INDUSTRIALE**

<u>Proponente</u>	<u>Argomento N°</u>
Prof.ssa ANNUNZIATA	1
Dr.ssa BALDOLI	8
Dr. BANFI	11
Dr.ssa BERLIN	16
Dr.ssa BERNARDI	22
Dr.ssa BERNASCONI	17
Dr.ssa BRADAMANTE	15
Prof. CINQUINI	1
Prof. COZZI	1
Prof. DALLA CROCE	2
Prof. DANIELI	3
Prof.ssa DEL BUTTERO	8
Prof DI SILVESTRO	4
Dr.ssa FERRARI	14
Prof.ssa GARANTI	5
Prof. GENNARI	6
Prof. LANDINI	7
Dr. LESMA	3
Prof.ssa LICANDRO	8
Dr.ssa MAIA	7
Prof. MAIORANA	8
Dr.ssa MANFREDI	11
Prof. MANITTO	9-10
Dr. MONTI	9
Prof. MONTANARI	11
Prof. NICOTRA	12
Prof.ssa ORSINI	13-14-17
Prof. PAGANI	15-16
Dr. PAGANI Antonio	8
Dr. PAGLIARIN	13
Dr. PASSARELLA	3
Dr. PANZA	12-20
Prof.ssa PELIZZONI	17
Dr. PENSO	7
Dr. POTENZA	22
Dr. POZZI Gianluca	11
Dr. QUICI	11
Dr.ssa L. RAIMONDI	1
Prof.ssa RANZI	10-18
Prof.ssa RICCA	19
Prof. RUSSO	20
Prof. SANNICOLO	21
Prof. SCOLASTICO	22
Dr. SELLO	17-23
Dr. SISTI	13
Prof.ssa SPERANZA	9
Prof VALCAVI	24
Dr.ssa VEROTTA	14

**1. PROF. CINQUINI MAURO, PROF. FRANCO COZZI, PROF.SSA RITA ANNUNZIATA, DR.SSA RAIMONDI LAURA**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Composti organometallici di titanio, samario e alluminio e boro in sintesi stereoselettive.
- 2) Studio stereochimico delle interazioni di non-legame.
- 3) Sintesi stereoselettiva di molecole bio-attive anche su matrice polimerica
- 4) Razionalizzazione del decorso stereochimico di reazioni stereoselettive mediante l'applicazione di metodi teorici.
- 5) Analisi conformazionale di molecole strutturalmente complesse via NMR e Molecular Modeling

**2. PROF. DALLA CROCE PIERO**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Sintesi e reattività di sistemi elettrociclici.
- 2) Reazioni di cicloaddizioni.

**3. PROF. DANIELI BRUNO, DR. LESMA GIORDANO, DR. PASSARELLA DANIELE**

1. Sintesi totali stereo - ed enantioselettive di composti ad attività biologica
2. Metodologie di ottenimento di sintoni chirali mediante l'uso di induttori di chiralità e biocatalizzatori.
3. Studio delle proprietà chemoselettive e regioselettive degli enzimi.
4. Reazioni di formazione di legami C-C ad opera di sistemi biocatalitici.

**4. PROF. DI SILVESTRO GIUSEPPE**

*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.

**5. 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.

**6. PROF. GENNARI CESARE**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Sintesi di composti chirali di interesse biologico e farmaceutico mediante nuovi metodi di sintesi asimmetrica.
- 2) Sviluppo di nuovi metodi di sintesi asimmetrica mediante l'uso di composti organometallici chirali di boro, titanio e molibdeno.
- 3) Sintesi asimmetrica di pseudopeptidi contenenti il legame solfonammidico.
- 4) Studio con il computer delle strutture di transizione di reazioni organiche stereoselettive (condensazioni aldoliche, ciclizzazioni radicaliche, reazioni di allilazione, reazioni di Diels-Alder, etc.).

**Nota:** per ciascun argomento è possibile assegnare più tesi. Gli argomenti sono validi per entrambi i corsi di laurea (Chimica e Chimica Industriale).

**7. 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 industriale.
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 e in mezzi omogenei poco polari.
4. Fluorurazioni selettive di composti organici anche biologicamente attivi.
5. Sintesi e applicazioni industriali di catalizzatori di trasferimento di fase "incarcerati" insilicaliti.

**Argomenti di tesi per Chimici:** N. 3-4

**Argomenti di tesi per Chimici Industriali:** N. 3-4

**8. PROF. MAIORANA STEFANO, PROF.SSA DEL BUTTERO PAOLA, PROF.SSA LICANDRO EMANUELA, DR.SSA BALDOLI CLARA, DR. PAGANI ANTONIO**

*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 anche per l'ottenimento di materiali con proprietà ottiche non lineari del secondo ordine.
  - b) Sintesi di composti organici (eterociclici e non) biologicamente attivi.
  - c) Sintesi asimmetrica mediante ausiliari chirali organometallici.
  - d) Trasformazioni selettive di composti organometallici catalizzate da enzimi.

**9. PROF. MANITTO PAOLO, DR. MONTI DIEGO, PROF.SSA SPERANZA GIOVANNA**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Sintesi asimmetrica: sintesi chemoenzimatiche ed enantioselettive di prodotti naturali.
- 2) Reazioni enzimatiche: determinazione della criptostereochimica di reazioni catalizzate da diol deidratasi..
- 3) Sostanze naturali: studi strutturali e conformazionali di molecole di interesse alimentare.
- 4) Chimica biorganica: studio delle reazioni catalizzate da enzimi adenosilcobalamina dipendenti.
- 5) Applicazioni sintetiche della decomposizione dei diazochetoni con complessi di rodio.
- 6) Sintesi di sostanze naturali.

**10. 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.

**11. PROF. MONTANARI FERNANDO, DR.SSA MANFREDI AMEDEA, DR. QUICI SILVIO, DR. BANFI STEFANO, DR. POZZI GIANLUCA**

- 1) Progettazione, sintesi e caratterizzazione di recettori multidentati (aciclici, macrociclici, polimacrociclici e macropoliciclici), loro complessazione con cationi metallici, anioni e molecole neutre, loro impiego come attivatori, trasportatori, sensori, ecc.
- 2) Progettazione e sintesi di recettori che per autoaggregazione attraverso legami a idrogeno o chelazione di metalli

- danno luogo a congegni supramolecolari con specifica funzione d'uso.
- 3) Progettazione e sintesi di sensori fluorescenti multicomponenti per cationi, anioni e molecole neutre.
  - 4) Progettazione e sintesi di leganti per la preparazione di nuovi composti organometallici caratterizzati da elevata risposta ottica non lineare del secondo e terzo ordine.
  - 5) Reazioni catalitiche di ossidazione, riduzione e carbonilazione in sistemi polifasici fluoroso-organici (FBS).
  - 6) Sintesi di leganti fosfinici perfluorurati.
  - 7) Metallo-porfirine e complessi metallo-salen selettivamente solubili in solventi perfluorurati.
  - 8) Catalisi enantioselettiva in FBS.
  - 9) Sintesi di materiali ibridi organico-inorganici mediante tecniche sol-gel e funzionalizzazione di polimeri inorganici.
  - 10) Proprietà di fase di molecole anfifiliche sintetiche (fluorofile-organofile e idrofile-lipofile).

## **12. PROF. NICORA FRANCESCO, DR. PANZA LUIGI**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Sintesi di molecole con potenziale attività antivirale.
- 2) Sintesi di analoghi non metabolizzabili di carboidrati con potenziale attività antiiperglicemica.
- 3) Approcci biotecnologici alla sintesi di molecole di interesse biologico.
- 4) Sintesi di analoghi di mono e oligosaccaridi e studio della loro azione sulla infettività.

## **13. PROF.SSA FULVIA ORSINI, DR. MASSIMO SISTI, DR. ROBERTO PAGLIARIN**

*Argomenti di tesi (metodologie di sintesi):*

- Sintesi di nuovi chelanti di metalli paramagnetici e studio dei relativi complessi quali mezzi di contrasto per MRI e reagenti di shift di cationi e anioni endogeni
- Sintesi asimmetrica di acidi fosfonici
- Nuovi reagenti organometallici (Zn e Co) e loro impiego in sintesi regio- e stereoselettive

**posti disponibili: 4**

## **14. PROF.SSA FULVIA ORSINI, DR.SSA MARINELLA FERRARI, DR.SSA LUISA VEROTTA**

*Argomenti di tesi ( sostanze naturali di interesse biologico):*

- Elucidazione di struttura
- Modificazioni strutturali volte al miglioramento dell'attività biologica

**posti disponibili: 2**

## **15. PROF. PAGANI GIORGIO, DR.SSA BRADAMANTE SILVIA**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Monitoraggio NMR (<sup>1</sup>H, <sup>31</sup>P, <sup>13</sup>C) di ossidazione radicaliche in sistemi biologici.
- 2) Analisi NMR di fluidi biologici.
- 3) Analisi NMR strato solido di materiali e modellistica molecolare al computer.
- 4) Sintesi di sistemi eterociclici leganti di ioni metallici per la preparazione di chelati ad uso biomedico e quali catalizzatori.

## **16. PROF. PAGANI GIORGIO, DR.SSA BERLIN ANNA**

*Argomento 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.

**Note:** Il lavoro sperimentale comprende stadi di sintesi organica del prodotto, sua caratterizzazione spettroscopica seguita da preparazione (anche elettrochimica) del materiale e sua caratterizzazione chimica ed elettrica.

**17. PROF.SSA PELIZZONI FRANCESCA, PROF.SSA ORSINI FULVIA, DR.SSA SILVIA BERNASCONI  
DR. SELLO GUIDO**

*Argomenti di tesi (biotecnologia):*

Microorganismi ingegnerizzati nella sintesi organica:

- Processi ossidativi nella produzione alternativa di "chemicals"
- Ottenimento di composti enantiomericamente puri come ausiliari chirali e sintoni

**posti 4**

**18. PROF.SSA RANZI BIANCA MARIA**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Biocatalisi con microorganismi ingegnerizzati (in collaborazione con prof. Manitto).
- 2) Utilizzo e smaltimento di reflui agroindustriali con lieviti ricombinati.

**19. PROF.SSA RICCA GIULIANA**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Studi strutturali di sostanze uniche mediante spettroscopia NMR; derivatizzazione con reagenti isotopicamente arricchiti.
- 2) Applicazioni delle tecniche spettroscopiche ed analitiche nello studio di agenti inquinanti del suolo.
- 3) Impiego della spettroscopia <sup>15</sup>N-NMR nello studio della dinamica dell'azoto in matrici vegetali arricchite in <sup>15</sup>N, prima e dopo compostaggio.

**20. PROF. RUSSO GIOVANNI, DR. PANZA LUIGI**

*Argomenti di tesi:*

- 1) Studi di relazione struttura-attività di oligosaccaridi di interesse biologico. Sintesi di oligosaccaridi e modificazioni volte a realizzare glicoconiugati, diagnostici e vettori di farmaci.

Sono attualmente allo studio:

- a) oligosaccaridi con potenziale attività immunogenica in vista di un possibile impiego quali vaccini sintetici;
- b) oligosaccaridi parzialmente solfatati correlati alla classe dei glicosamminoglicani nell'ambito dello studio del processo di attivazione dei fattori di crescita dei fibroblasti.

- 2) Sintesi chemoenzimatica di oligosaccaridi tipici del latte umano dotati di attività protettive e preventive per l'infanzia.

- 3) Modificazioni strutturali di carboidrati con metodi chimici ed enzimatici.

- 4) Nuovi metodi di sintesi di C-glicosidi amminoacidi.



## 21. PROF. SANNICOLÒ FRANCO

1) *Reazioni stereoselettive catalizzate da complessi di metalli di transizione con nuovi leganti chirali*

*Sintesi di nuovi leganti difosfonici chirali a scheletro biarilico, a rotazione impedita attorno al legame interanulare e contenenti sistemi eterociclici.*

*Risoluzione dei leganti racemi, valutazione della stabilità configurazionale e della purezza enantiomerica.*

*Formazione dei complessi catalitici con metalli di transizione e loro applicazione in reazioni enantio e diastereoselettive in fase omogenea, in particolare reazioni di idrogenazione, di idroformilazione e di formazione di legami carbonio-carbonio.*

*Valutazione degli eccessi enantiomerici e diastereomerici dei prodotti di reazione.*

2) *Nuovi materiali polimerici a base tiofenica per l'elettronica*

*Sintesi di nuovi monomeri a base tiofenica forniti di funzioni speciali.*

*Caratterizzazione chimica e fisica dei monomeri.*

*Polimerizzazione chimica e/o elettrochimica dei monomeri.*

*Caratterizzazione dei materiali polimerici risultanti.*

*Studio degli effetti della struttura dei monomeri (caratteristiche elettroniche e geometriche) sulle proprietà dei corrispondenti polimeri.*

*Applicazione dei materiali ottenuti in sistemi con funzione di sensori.*

## 22. PROF. SCOLASTICO CARLO, DR.SSA BERETTA M. GRAZIA, DR.SSA POTENZA DONATELLA, DR.SSA BERNARDI ANNA

*Argomenti di tesi:*

1) Sintesi di composti biologicamente attivi.

2) Sviluppo di nuovi metodi di sintesi asimmetrica.

3) Progettazione di molecole biologicamente attive con l'ausilio di metodi computazionali:

a) correlazioni struttura-attività

b) modellistica molecolare dell'interazione recettoriale.

4) Modellistica molecolare con il computer di processi stereoselettivi (reazioni di addizione coniugata, epossidazione di oppi legami isolati, ecc.).

## 23. DR. GUIDO SELLO

*Argomenti di tesi (modellistica):*

- Nuove metodologie per l'applicazione della similarità alla modellistica chimica nella progettazione di sintesi, nella classificazione delle reazioni e nella determinazione della similarità/dissimilarità strutturale

- Modelli per la previsione di prodotti di reazione: ruolo della geometria e delle interazioni deboli

- Nuove metodologie in sistemi esperti per affinare la progettazione della sintesi

**posti disponibili: 2**

## 24. PROF. VALCAVI UMBERTO

*Argomenti di tesi:*

1) Sintesi di composti di interesse biologico-farmacologico.

2) Utilizzo nella sintesi di enzimi naturali e artificiali.

**DOCENTI CHIMICI DEI CORSI DI LAUREA IN CHIMICA E IN CHIMICA INDUSTRIALI PRESSO ALTRI  
DIPARTIMENTI**

**Dipartimento Scienze dell'Ambiente e del Territorio - Bicocca**

Via Emanuelli, 15 tel. 02/6447 4731

Prof. Roberto TODESCHINI

Prof. Demetrio PITEA

**Dipartimento Scienze dei Materiali - Bicocca**

Via Emanuelli, 15 tel. 02/6617 4102

Prof. Michele CATTI

Prof. Claudio M. MARI

Prof.ssa Franca MORAZZONI

Prof. Sergio PIZZINI

Dr. Dario NARDUCCI

**N.B.:** l'elenco sopra riportato è incompleto e potrà subire variazioni.