

Syllabus per test di ingresso Laurea Magistrale in Scienze Chimiche AA. 2021/2022

Chimica Analitica

Equilibrio chimico

Energia libera di Gibbs ed equilibrio chimico. Costante di equilibrio termodinamica e stechiometrica. Fattori che influenzano la costante di equilibrio. Forza ionica. Attività e coefficiente di attività. Teoria di Debye-Huckel.

Equilibri acido-base

Prodotto ionico dell'acqua. Definizione di pH. Forza di acidi e basi. Acidi e basi forti: calcolo del pH e contributo della dissociazione dell'acqua. Bilancio di massa, bilancio protonico, bilancio di carica. Acidi e basi deboli: calcolo rigoroso del pH. Soluzioni tampone. Potere tampone. Acidi poliprotici e basi poliacide. Anfoliti. Curve di titolazione: acido forte-base forte, acido debole monoprotico-base forte, acido debole poliprotico-base forte.

Equilibri di precipitazione

Prodotto di solubilità. Solubilità, effetto dello ione in comune, del pH e della formazione di complessi. Titolazioni di precipitazione.

Equilibri di complessazione

Definizione di complesso. Leganti mono e polidentati. Grado di formazione. Effetto del pH sugli equilibri di complessazione. EDTA. Costante di formazione condizionale.

Equilibri redox

Titolazioni redox.

Elementi di statistica

Errori nelle misure sperimentali. Statistica descrittiva: indici di posizione e dispersione. Precisione, accuratezza. Inferenza statistica: intervalli di confidenza, test di verifica di ipotesi. Cifre significative. Propagazione degli errori. Metodi di regressione lineare.

Metodi spettroscopici

Radiazione elettromagnetica e spettro elettromagnetico. Rifrazione, riflessione interna totale. Interazione radiazione materia: riflessione, trasmissione/assorbimento, diffusione. Assorbimento ed emissione delle radiazioni. Fluorescenza, fosforescenza.

Spettroscopia molecolare di assorbimento UV-vis

Trasmittanza, assorbanza, Legge di Beer, Limitazioni della legge di Beer. Spettrofotometro a raggio singolo, Spettrofotometro a doppio raggio.

Spettroscopia di assorbimento IR

Caratteristiche generali. Oscillatore armonico ed anarmonico. Modi vibrazionali molecolari. Spettrofotometri in trasformata di Fourier. Caratteristiche spettro IR ed interferenze.

Spettroscopia di assorbimento ed emissione atomica.

Origine degli spettri atomici. Principio della tecnica e applicazioni. Schema della strumentazione.

Metodi elettrochimici

Caratteristiche generali. Cella galvanica. Potenziale elettrodo. Equazione di Nernst. Cella elettrolitica. Potenziale di giunzione, ponte salino. Metodi elettroanalitici. Elettrodi di riferimento. Elettrodi indicatori. Elettrodo a vetro. Potenzimetri, Voltammetria.

Metodi cromatografici

Introduzione alle tecniche cromatografiche. Equazione di Van Deemter. Cromatografia su colonna e su strato sottile. Gascromatografia. Cromatografia liquida ad alte prestazioni. Cromatografia ionica.

Spettrometria di massa.

Principio di funzionamento. Sorgenti ioniche. Analizzatori di massa: settore magnetico, quadrupolo, tempo di volo, trappola ionica.

Chimica Fisica

Principi di base di Termodinamica

Concetto di Sistema termodinamico. Teoremi di conservazione dell'energia. Energia interna di un sistema. Entalpia, Entropia, Funzionali di Energia libera (Gibbs ed Helmholtz). Calori specifici nei gas e teoria cinetica.

Entalpia e termochimica

Entropia, probabilità dello stato e processi spontanei. Probabilità termodinamica ed entropia. Forma generale per la probabilità termodinamica. La distribuzione di Boltzmann di energia fra stati termodinamici. Terzo principio, entropia di mescolamento e di difetti di punto.

Potenziale chimico ed equilibri di fase.

Equilibrio chimico, costante termodinamica, attività e coefficienti di attività.

Transizioni di fase

Principi base di quantomeccanica

Significato della funzione d'onda di un sistema.

Operatori ed equazione agli autovalori: Equazione di Schrödinger. Semplici applicazioni a sistemi atomici e molecolari.

Cenni sui metodi di approssimazione.

Classificazione delle Forze intermolecolari. Campi di forza media e Potenziale di Lennard-Jones.

Forze di tipo elettrostatico: ione-dipolo e dipolo-dipolo. Forze di polarizzabilità: elettroniche e orientazionali. Processi di solvatazione e ripartizione fra fasi.

Particella nella scatola, Effetto tunnel. Oscillatore armonico ed anarmonico. Rotatore rigido.

Atomo di idrogeno, Metodo variazionale; Metodo degli orbitali molecolari e struttura elettronica degli atomi; Metodo del legame di valenza e dell'orbitale molecolare e struttura elettronica di molecole semplici

Cinetica

La velocità delle reazioni chimiche. Leggi cinetiche semplici e costanti cinetiche.

Integrazione di equazioni cinetiche semplici.

Dipendenza della velocità di reazione dalla temperatura.

Meccanismi di reazione. Reazioni elementari. Reazioni consecutive, parallele e pre-equilibri. Lo step cineticamente determinante.

Teoria degli urti e complesso attivato.

Dinamica delle reazioni e superfici di energia potenziale.
Equazione di Arrhenius ed energia di attivazione

Nozioni di base di Superfici ed interfacce

Definizione di interfaccia. Energia libera di interfaccia e tensione superficiale. Interfacce fra fluidi: equazioni di Young-Laplace e di Kelvin. Surfattanti, adsorbimento, bagnabilità di superfici.

Sistemi dispersi. Colloidi, emulsioni e schiume.

Interfacce elettricamente cariche. Potenziale di Volta, di Galvani e di Superficie. Funzione-lavoro e potenziale elettrochimico. Doppio strato elettrico: Distribuzione di potenziale da una superficie carica - Equazione di Poisson-Boltzmann – Distribuzione di concentrazione di ioni e distribuzione di densità di carica in funzione del potenziale.

Principi di elettrochimica

Semireazioni ed elettrodi

Potenziale di cella ed equazione di Nernst

Misura elettrochimica della costante di equilibrio e delle grandezze termodinamiche

Interazione radiazione – materia

Processi fotochimici

Processi fotofisici.

Principi di base di spettroscopia molecolare.

Spettroscopia elettronica. Transizioni elettroniche in molecole biatomiche e poliatomiche. Regole di selezione. Principio di Franck-Condon e transizioni vibroniche. Spettroscopia di fotoelettroni.

Gli stati elettronici eccitati. Spettroscopia di fluorescenza.

L'emissione stimolata. I laser.

Chimica Generale e Inorganica

Grandezze, dimensioni e unità di misura; Atomi, elementi, simboli chimici, miscele, composti, allotropi, nomenclatura chimica: Metalli e non metalli; ossidi, idrossidi, anidridi, acidi, ossoanioni e sali.

Struttura dell'atomo

Particelle subatomiche: elettrone, protone, neutrone; Numero atomico e Numero di Massa, isotopi, spettrometro di massa, unità di massa atomica, peso atomico/massa atomica relativa, massa molecolare relativa.

Spettro elettromagnetico. Leggi della fisica classica, esperimento di Young, radiazione del corpo nero. Quantizzazione dell'energia di Plank. Effetto fotoelettrico. Esperimento di Rutherford.

Modello atomico di Bohr e problemi insiti nel modello. Dualismo onda-particella: De Broglie.

Esperimento di Davisson and Germer. Descrizione meccanico / ondulatoria dell'atomo. Cenni sull'equazione di Schrodinger. Principio di indeterminazione di Heisenberg. Orbitali dell'atomo d'idrogeno. Numeri quantici. Curve di densità di probabilità radiale. Atomi polielettronici; effetti di schermaggio e di penetrazione. Stati elettronici e Principio di esclusione del Pauli, regole di Hund.

Sistema periodico degli elementi

Classificazione periodica e configurazione elettronica degli elementi. Proprietà periodiche: raggi atomici e ionici, energia di ionizzazione, affinità elettronica ed elettronegatività.

Stechiometria

Il concetto di mole e leggi fondamentali che regolano l'andamento delle reazioni chimiche. L'equazione chimica ed il suo bilanciamento. Classificazione delle principali reazioni chimiche. Rapporti quantitativi nelle reazioni chimiche. Composti ionici e composti molecolari; dissociazione elettrolitica; numeri di ossidazione, concetti di ossidante e riducente, ossidarsi e ridursi. Reazioni di ossido-riduzione e loro bilanciamento. Determinazione della formula di un composto. Applicazioni numeriche.

Legame chimico

Concetti sui legami ionico, covalente e dativo. Formalismo di Lewis e teoria del legame di valenza. Formule di struttura dei composti più comuni che rispettano la regola dell'ottetto e di quelli con gusci di valenza espansa; ossiacidi comuni e loro anioni; concetto di risonanza. Elettronegatività degli atomi e polarità dei legami. Momenti di dipolo in molecole semplici. Geometrie molecolari: stato di promozione del carbonio, teoria dell'ibridizzazione, orbitali ibridi sp^3 , sp^2 , sp . Geometria molecolare e teoria V.S.E.P.R. Variazione dell'energia potenziale durante la formazione di H_2 . Energia reticolare e legame ionico. Ciclo di Born-Haber. Proprietà fisiche dei composti ionici. Legame chimico e teoria degli orbitali molecolari, orbitali σ e π ; diagrammi degli orbitali molecolari per molecole biatomiche omonucleari. Ordine, lunghezza, costante di forza ed energia di legame; molecole biatomiche eteronucleari; diagramma di Walsh. Legame metallico e cenni di teoria delle bande. Proprietà fisiche dei composti covalenti. Legame metallico e cenni di teoria delle bande.

Forze intermolecolari

Forze intermolecolari: ione – ione, ione – dipolo, dipolo – dipolo, forze di Van der Waals e di London. Legame ad idrogeno e punti di ebollizione di H_2O , H_2S , H_2Se . Tensione superficiale.

Termodinamica chimica

Stato gassoso

Caratteristiche generali dello stato gassoso. Gas ideali, significati molecolari di pressione e temperatura, leggi di Boyle, Charles, Gay-Lussac, Dalton; volumi molari (legge di Avogadro), equazione di stato dei gas ideali, gas reali, equazione di Van der Waals, gas e vapori. Legge delle pressioni e dei volumi parziali. Diffusione dei gas. Applicazioni numeriche.

Stati condensati e cambiamenti di stato

Caratteristiche dello stato solido in funzione del legame chimico: solidi cristallini: solidi metallici, ionici, covalenti e molecolari. Solidi amorfi: colloidali, vetri.- Caratteristiche dello stato liquido, tensione di vapore e temperatura di ebollizione di liquidi puri. Cambiamenti di stato. Diagramma di stato dell'acqua e dell'anidride carbonica- Principio dell'equilibrio mobile.

Soluzioni acquose

Solvente, soluto, soluzioni gassose, liquide e solide, interazioni tra soluto e solvente, legame ad idrogeno, unità di misura della concentrazione: % in massa ed in volume, peso equivalente e normalità, molarità, molalità, frazioni molari. Proprietà colligative di elettroliti in soluzione: Tensione di vapore di soluzioni ideali e reali, Legge di Raoult, distillazione, azeotropi. Soluzioni di soluti non volatili. Grado e fattore di dissociazione. Abbassamento relativo della tensione di vapore del solvente, ebullioscopia e crioscopia. Osmosi e pressione osmotica. Soluzioni elettrolitiche e grado di dissociazione. Solubilità e legge di Henry. Applicazioni numeriche.

L'equilibrio chimico

Elementi di termodinamica chimica. L'equilibrio nei sistemi chimici omogenei - Legge di azione di massa e costanti di equilibrio: K_p , K_c , K_x . Fattori che influenzano l'equilibrio: temperatura e pressione. Equilibri ionici in soluzione acquosa. Teorie degli acidi e delle basi. Acidi e basi di Arrhenius, Bronsted e Lewis. Anfoliti. Ioni complessi in soluzione acquosa, acidi e basi poliprotici. Reazioni acido-base e stechiometria delle soluzioni. Forza degli acidi e delle basi. Acidi e basi forti e deboli. Autodissociazione dell'acqua e definizioni di pH e pOH e pKw. Titolazione HCl-NaOH. pH di acidi e basi forti e deboli: definizioni di pKa, pKb. Idrolisi di sali e calcoli di pH. Soluzioni tampone acide, basiche. Indicatori di pH. Equilibri eterogenei - Prodotto di solubilità. Applicazioni numeriche.

Elettrochimica

Elettrodi metallici, misure di d.d.p., celle galvaniche, equazione di Nerst. Elettrodi di seconda specie (Ag/AgCl/KCl). Elettrodi di terza specie: Pt / $Fe^{2+} - Fe^{3+}$; Pt / Mn^{2+} ed MnO_4^- , Pt / Chinidrone. Elettrodo normale standard ad idrogeno. Elettrodo a calomelano saturo. Serie dei potenziali standard di semielementi, previsioni di reazioni red-ox. Reazioni di disproportionazione. Pile di concentrazione. Determinazione elettrochimica del pH. Elettrolisi e leggi di Faraday. Sovratensione, elettrolisi dell'acqua, di soluzioni di NaCl, di $ZnSO_4$; accumulatore al piombo. Applicazioni numeriche.

Cinetica Chimica

Velocità di reazione, ordine di reazione, tempo di dimezzamento, molecolarità di reazione, teoria degli urti (collisioni), equazione di Arrhenius ed energia di attivazione, fattori che influiscono sulla velocità di reazione, catalizzatori.

Chimica inorganica degli elementi del blocco s-p

Metalli e non metalli: generalità sulle proprietà chimiche e fisiche. Caratteristiche generali di ciascun gruppo del sistema periodico: Principali stati di ossidazione, reperimento in natura, preparazione degli elementi e dei più importanti composti di: Idrogeno, Metalli alcalini e alcalino terrosi Boro, Alluminio, Carbonio, Silicio, Azoto, Fosforo, Ossigeno, Zolfo e Fluoro, Cloro, Bromo, Iodio; usi e chimismo dei gas nobili.

Chimica inorganica degli elementi di transizione

Caratteristiche generali degli elementi di transizione. Leganti. Numero di coordinazione e geometria. Classificazione dei leganti: per atomo donatore; mono e polidentati; leganti σ e leganti π . Cenni sulle teorie del legame chimico nei composti di coordinazione, Teoria Crystal Field, CFSE, Complessi ad alto e basso spin. Complessi ottaedrici, tetraedrici, planari quadrati, effetto Jahn Teller. Regola dei 18 elettroni. Costanti di formazione dei complessi. Stabilità di ioni complessi in soluzione acquosa. Effetto di chelazione e del macrociclo. Chimica degli elementi della prima serie di transizione: caratteristiche generali; preparazione, proprietà ed uso degli elementi. Ossidi, alogenuri e complessi più comuni: sintesi e reattività di Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn.

Chimica Organica

Introduzione alla chimica del carbonio.

Teoria degli orbitali ibridi sp^3 , sp^2 , sp . Classificazione dei composti organici e gruppi funzionali. La nomenclatura IUPAC per i composti organici. Rappresentazione delle molecole sul piano e nello spazio.

Le reazioni in chimica organica.

Rottura dei legami chimici e simbolismo delle frecce. Carbocationi, carbanioni e radicali alchilici. Meccanismi di reazione e diagrammi energetici. Elettrofili e nucleofili. Reazioni regio selettive, stereo selettive e stereospecifiche.

Isomeria e Stereoisomeria.

Isomeria costituzionale, conformazionale e configurazionale. Chiralità. Configurazione relativa e assoluta. Enantiomeri, diastereoisomeri e composti meso.

Idrocarburi alifatici: alcani, alcheni e alchini.

Proprietà chimiche e fisiche. Isomeria geometrica negli alcheni. Principali reazioni di addizione negli alcheni e negli alchini.

Composti aromatici.

Concetto di aromaticità. Struttura e proprietà del benzene. Reazioni di sostituzione elettrofila e di sostituzione nucleofila aromatica. Fenolo e sue proprietà.

Alogenuri alchilici e arilici. Proprietà chimiche e fisiche.

Alcoli. Proprietà chimiche e fisiche. Eteri, epossidi, tioli e solfuri.

Reazioni di sostituzione nucleofila alifatica e di β -eliminazione:

I meccanismi mono- e bimolecolare. Competizione tra le reazioni di sostituzione ed eliminazione.

Composti carbonilici.

Aldeidi e chetoni: proprietà chimiche e fisiche. Addizione nucleofila. Enoli ed enolati. Tautomeria cheto-enolica. Acidità dell'idrogeno in alfa al carbonile e reazioni correlate. Condensazione aldolica e di Claisen. Carbonili alfa/beta insaturi. Effetti della coniugazione. Reazioni di addizioni coniugate.

Acidi carbossilici e derivati.

Proprietà chimiche e fisiche. Esterificazione di Fischer. Alogenuri acilici, esteri, anidridi, ammidi, nitrili. Reazioni di sostituzione nucleofila acilica e di idrolisi.

Ammine. Proprietà chimiche e fisiche.

Composti organometallici e principi di base per la formazione di nuovi legami C-C.

Composti eterociclici alifatici ed aromatici.

Proprietà chimiche e fisiche. Epossidi, aziridine, azirine e tiirani. Classificazione degli eterocicli aromatici: Furano, pirrolo, tiofene e piridina. Composti eteroaromatici con due o più eteroatomi.

Carboidrati.

Aldosi e chetosi. Proprietà chimiche e fisiche dei monosaccaridi. Principali reazioni dei monosaccaridi. Formazione di glicosidi. Zuccheri riducenti e non riducenti. Mutarotazione. Disaccaridi e polisaccaridi.

Amminoacidi, peptidi e proteine.

Struttura e proprietà acido-base degli amminoacidi. Il punto isoelettrico. Metodi di sintesi degli amminoacidi e di peptidi. Struttura delle proteine.

Lipidi.

Proprietà chimiche e fisiche di trigliceridi, prostaglandine, steroidi, terpeni, fosfolipidi, liposomi, lecitine, sfingofosfolipidi.

Principi di base su cicloaddizioni e reazioni pericicliche.**Tecniche generali di purificazione dei composti organici**

Filtrazione, cristallizzazione, essiccamento, sublimazione, distillazione (semplice, frazionata, sotto vuoto), estrazione con solvente.

Principi di base della Spettroscopia NMR.