



## COURSE PROGRAM

<b>COURSE</b>	<b>GENERAL AND BIO-INORGANIC CHEMISTRY</b>				
<b>1<sup>st</sup> YEAR</b>	<b>PROFESSOR</b>	<b>MODULE</b>	<b>SSD</b>	<b>CFU</b>	<b>HOURS</b>
	Marilena <b>CARBONE</b>	0	CHIM/03	<b>2</b>	16
	Carbone+ Gontrani	I	CHIM/03	<b>4 (1+3)</b>	32
	Marilena <b>CARBONE</b>	II	CHIM/03	<b>6</b>	48

<b>PROFESSOR</b>	Marilena Carbone
<b>ATTENDANCE</b>	Compulsory
<b>OFFICE HOURS</b>	Tuesday –Thursday 13.00-14.00 pp1 room8
<b>E-Mail/Contact</b>	carbone@uniroma2.it

<b>PROFESSOR</b>	Lorenzo Gontrani
<b>ATTENDANCE</b>	Compulsory
<b>OFFICE HOURS</b>	Tuesday –Thursday 11.00-12.00 pp1 room8
<b>E-Mail/Contact</b>	Lorenzo.Gontrani@uniroma2.it



<b>SPECIFIC AIMS</b>	At the end of the course, the students are geared to be conversant with the foundations of chemistry, and familiar with atomic and molecular structures, along with their reactivity. This process goes through the learning of the fundamental outcomes of quantum-mechanics that drive the atomic structures and of the thermodynamic laws and principles that guide the physical and chemical transformations of matter. They are expected to get skilled in stoichiometric issues and to gain technical perspectives to forecast the chemical reactivity based on chemical structures. It is specifically required to get acquainted the chemistry of transition metals and nanostructured material and evaluating their impact in life science.
<b>OBIETTIVI</b>	Acquisizione dei concetti fondamentali di chimica, familiarità con le strutture atomiche e molecolari e loro reattività, attraverso il consolidamento dei concetti più comuni di quantomeccanica e l'apprendimento delle leggi della termodinamica e dei principi di chimica e di fisica che regolano le trasformazioni della materia. Ci si aspetta lo sviluppo di abilità nel trattare la stechiometria delle reazioni e dei processi, della capacità di prevedere la reattività chimica in base alle strutture chimiche e l'acquisizione di conoscenze sulle proprietà fondamentali dei materiali inorganici, per la valutazione del loro impatto in applicazioni biomediche.
<b>PREREQUISITES</b>	Basic knowledge of mathematics: logarithms, quadratic equations, exponentiation and rooting.
<b>PREREQUISITI</b>	Prerequisiti di matematica: conoscenza dei logaritmi, dell'elevamento a potenza, della soluzione di equazioni quadratiche e dell'estrazione di radici.
<b>PROGRAM</b>	<b>Module 0.</b> Definition of intensive and extensive properties, pressure, volume, density. Concept of mole, and calculation of the molarity of a solution. Definition of acids and bases according to the Brønsted theory. Distinction between strong and weak acids. Definition of the pH and calculation of pH variations with dilutions. The law of definite proportions and the calculation of the empirical formula. Reactions balancing. Calculation of the equilibrium constant from equilibrium concentrations. Application of the law of ideal gases. Ionization energy, electronegativity, typical oxidation states of the elements depending on group and period. Balancing of redox reactions. Naming of salts and acids. <b>Module I.</b> Basic principles of thermodynamics. The first principle and the concept of enthalpy. Standard enthalpies of formation and of reaction. Hess's law. The second and third principles of thermodynamics. Criteria for spontaneous reactions: entropy, free energy, and equilibrium constants. Principles of chemical equilibria. Dynamic equilibrium. Vapour pressure of liquids and Clapeyron equation. Phase diagrams. Solutions concentrations. Solubility of gases and Henry's law. Vapour pressures of solutions, and Raoult's law. Freezing-point depression and boiling-point elevation of non-



	<p>electrolyte solutions. Osmotic pressure. Solutions of electrolytes. Definition of acids and bases. Arrhenius theory. Self-ionization of water and the pH scale. Molecular structure and acid-base behaviour: strong acids and strong bases, weak acids and weak bases. Polyprotic acids and bases. Ions as acids and bases. Pauling rules for the estimate of the pKa. Buffer solutions. Lewis acids and bases. Solubility and solubility product constant, <math>K_{sp}</math>. Common-ion effect in solubility equilibria. Criteria for precipitation and its completeness. Solubility and pH, fractional precipitation and ion separation. Electrochemistry: free energy of reduction reactions, electrode potentials and their measurement: the Nernst equation. Standard electrode potentials. Electrode potential as a function of concentrations. Cell potentials and equilibrium constants. Batteries: producing electricity through chemical reactions. Electrolysis.</p> <p><b>Module II.</b> Elements of quantum mechanical theory, quantum numbers and their correlation, radial and angular distribution function. Hydrogen-like atoms, polyelectron atoms, the Russell and Saunders coupling. Atomic term symbols. The VSEPR theory. The Lewis structures. Hybridization and geometry of the molecules. The LCAO method and molecular orbital theory. Coefficients of linear combinations in homonuclear and heteronuclear molecules. Requisites for molecules formation. Bond order. Molecular orbital diagrams of HF, CO, N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, F<sub>2</sub>.</p> <p>Complexes: definition, typical coordination number, types of ligands, complex stability, partial and total formation constants, chelation effect. Naming of complexes. Symmetry elements and chirality. Recognition of the chirality in octahedral complexes. Assignment of the absolute chirality in octahedral complexes. The crystal field theory, applied to tetrahedral, octahedral and square planar complexes. High and low spin complexes. The complexes described through the molecular orbital theory. The spectrochemical series and the <math>\pi</math> bonds in complexes. The Racah parameters, the spectroscopic terms, the Tanabe-Sugano and Orgel diagrams. The law of Lambert and Beer, the selection rules of Laporte and the UV-Vis spectra. Substitution reactions in complexes. Carbonyl complexes: properties and reactivity. The definition of apticipy in metallorganic complexes. Bio-inorganic complexes: heme and the most common chemotherapy drugs. The membrane potential.</p>
<b>PROGRAMMA</b>	<p><b>Modulo 0.</b> Definizione di grandezze intensive ed estensive, pressione, volume, densità. Concetto di mole, calcolo della molarità di soluzioni, definizione e calcolo del pH, definizioni di acido e base secondo Brönsted, distinzione tra acidi forti e deboli, calcolo delle variazioni di pH in funzione della diluizione, formula minima, legge delle proporzioni definite, bilanciamento delle reazioni chimiche. Calcolo della costante di equilibrio a partire da concentrazioni all'equilibrio, applicazione della legge dei gas ideali. Energia di ionizzazione, elettronegatività, stati di ossidazione tipici degli elementi in base al gruppo e al periodo di appartenenza. Nomenclatura di acidi e sali, di bilanciamento di reazioni redox.</p>



	<p><b>Modulo I.</b> I principi fondamentali di termodinamica. Il primo principio e l'entalpia. Entalpia standard di formazione e di reazione e la legge di Hess. Il secondo e terzo principio di termodinamica. Criteri per reazioni spontanee: entropia, energia libera e costanti di equilibrio. Pressione di vapore ed equazione di Clayperon. Diagrammi di fase. Solubilità dei gas a la legge di Henry. Pressione di vapore delle soluzioni e la legge di Raoult. Abbassamento del punto di congelamento e innalzamento del punto di ebollizione, in soluzioni di non elettroliti. Pressione osmotica e soluzioni di elettroliti. La teoria di Arrhenius. Autoionizzazione dell'acqua. Strutture molecolari e comportamento acido-base: acidi deboli e poliprotici. Ioni come acidi e basi. Regole di Pauling per la stima del pKa. Soluzioni tampone. Acidi e basi di Lewis. Solubilità e prodotto di solubilità. Effetto dello ione a comune. Criteri per la precipitazione. Solubilità in funzione del pH, precipitazione frazionata e separazione degli ioni. Elettrochimica: energia libera delle reazioni di riduzione, potenziali agli elettrodi e loro misura: l'equazione di Nernst. Potenziali elettrodi standard. Potenziali agli elettrodi in funzione delle concentrazioni. Potenziali di cella e costanti di equilibrio. Batterie: produzione di energia attraverso le reazioni chimiche. L'elettrolisi.</p> <p><b>Modulo II.</b> La struttura atomica, numeri quantici e loro correlazione, funzioni di distribuzione radiale e angolare, atomi polielettronici, accoppiamento di Russell and Saunders, simboli di termine atomici. Teoria VSEPR. Strutture di Lewis. Ibridazione e geometria delle molecole. Metodo LCAO e teoria degli orbitali molecolari. Coefficienti di combinazione lineare in molecole biatomiche omonucleari ed eteronucleari. Requisiti di formazione delle molecole. Ordine di legame. Diagrammi degli orbitali molecolari di HF, CO, N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, F<sub>2</sub>.</p> <p>Complessi: definizione, numeri di coordinazione tipici, tipi di ligandi, stabilità dei complessi, costanti di formazione parziale e totale, effetto della chelazione. Nomenclatura dei complessi. Elementi di simmetria e chiralità. Riconoscimento della chiralità in complessi ottaedrici. Assegnazione della chiralità assoluta in complessi ottaedrici. Teoria del campo cristallino, applicata a complessi tetraedrici, ottaedrici e quadrato-piani. Complessi ad alto e basso spin. I complessi attraverso gli orbitali molecolari. La serie spettrochimica e i legami <math>\pi</math> nei complessi. I simboli di termine spettroscopici. I diagrammi di Tanabe-Sugano e di Orgel. La legge di Lambert e Beer, le regole di selezione di Laporte e gli spettri UV-Vis dei complessi. Reazioni di sostituzione nei complessi. I complessi carbonilici: caratteristiche e reattività. Definizione di apticità in complessi organometallici. I complessi bio-inorganici eme e chemioterapici più comuni. Il potenziale di membrana.</p>
<b>TEXT BOOKS</b>	General Chemistry, Raymond Chang Inorganic Chemistry, Atkins
<b>TESTI ADOTTATI</b>	Chimica Generale, Raymond Chang Chimica Inorganica, Atkins



<b>EXAM METHOD</b>	Module 0 and Module I foresee a written exam. Module II is evaluated through an oral exam. The exams must be made strictly in sequence (Module 0 → Module I → Module II).
<b>MODALITA' D'ESAME</b>	Il Modulo 0 e il Modulo I prevedono un esame scritto. Il Modulo II prevede un esame orale. Gli esami vanno sostenuti strettamente in sequenza (Modulo 0 → Modulo I → Modulo II).
<b>EVALUATION</b>	The overall evaluation is based on 2 written exam, and one oral exam, with exercises to probe the skills and knowledges. Conceptual connection capabilities will be evaluated through tests which require combined notions. An oral part follows which is a public exam, where the knowledge of the fundamental concepts is probed, as well as the connection capability of different concepts and the impact of the same element in different contexts.
<b>VALUTAZIONE</b>	La valutazione complessiva si basa su due test scritti e uno orale, con esercizi finalizzati a verificare conoscenze e competenze. Capacità di connessione concettuale verranno verificate attraverso tests che prevedono l'utilizzo combinato delle conoscenze acquisite. Segue una verifica in cui l'apprendimento viene valutato attraverso un colloquio orale e pubblico in cui si richiede di dimostrare di aver acquisito i concetti fondamentali, di avere capacità di collegamento tra di loro i vari aspetti e di valutazione dell'impatto di un elemento in più contesti.