

## COURSE PROGRAM

A.Y.	SSD	COURSE	PROFESSOR	CFU
1° YEAR	CHIM/03	GENERAL AND BIO-INORGANIC	MARILENA CARBONE LORENZO GONTANI	9 3
	ATTENDANCE: 70% minimum	OFFICE HOURS: By e-mail appointment	e-mail/contact: <a href="mailto:carbone@uniroma2.it" style="color: blue; text-decoration: underline;">carbone@uniroma2.it</a>	

### SPECIFIC AIMS AND EXPECTED OUTCOMES

#### LEARNING OUTCOMES:

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.

#### KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING:

The fundamentals of chemical bonding, equilibria, structures, and transition metal complexes. Acquiring basic principles and concepts of chemical equilibria, symmetry, valence, approximations, shifts, levels and all tools at the root of good chemical understanding.

#### APPLYING KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING:

Analyze and synthesize chemical concepts, what they are based on and how to use them, with the ability to discuss them in a rigorous, innovative and original way.

#### MAKING JUDGEMENTS:

Successful students are supposed to quickly figure out whether the framework of an exercise and by extension of a chemical setting makes sense and which changes are necessary to obtain a workable solution.

#### COMMUNICATION SKILLS:

These classes foresee a number of short, on-the-fly presentations by the students to ensure their improvement in addressing, analyzing and prioritizing concepts, for an effective communication.

#### LEARNING SKILLS:

A pathway is promoted to develop of the capability of building knowledge from the foundations and singling out fundamental concepts from secondary and non-functional ones.

### OBIETTIVI E RISULTATI DI APPRENDIMENTO

**OBIETTIVI FORMATIVI:** 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.

**CONOSCENZA E CAPACITÀ DI COMPRESIONE:** I fondamenti del legame chimico, degli equilibri, delle strutture e dei complessi dei metalli di transizione. Acquisizione dei principi e concetti di base di equilibri chimici, simmetria, valenza, approssimazioni, spostamenti, livelli e tutti gli strumenti alla base di una buona comprensione chimica

**CAPACITÀ DI APPLICARE CONOSCENZA E COMPRESIONE:** Analizzare e valutare concetti chimici, su cosa si basano e come utilizzarli. Sviluppo della capacità di discuterli in modo rigoroso, innovativo e originale

**AUTONOMIA DI GIUDIZIO:** Gli studenti dovrebbero riuscire a valutare rapidamente se l'impianto di un esercizio e, per estensione, un'impostazione chimica ha senso e quali modifiche sono necessarie per ottenere una soluzione praticabile.

**ABILITÀ COMUNICATIVE:** Le lezioni prevedono una serie di presentazioni brevi e al volo da parte degli studenti per garantire il loro miglioramento nell'affrontare, analizzare e stabilire le priorità dei concetti, per una comunicazione efficace.

**CAPACITÀ DI APPRENDIMENTO:** Si promuove un percorso di sviluppo della capacità di costruire conoscenze dalle fondamenta e di individuare concetti fondamentali da quelli secondari

### PREREQUISITES

Basic knowledge of mathematics: logarithms, quadratic equations, exponentiation and rooting.

## PREREQUISITI

Conoscenza dei logaritmi, dell'elevamento a potenza, della soluzione di equazioni quadratiche e dell'estrazione di radici.

## PROGRAM

**Module 0.** 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.

**Module I.** 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-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,  $K_{sp}$ . 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.

**Module II.** 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, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, F<sub>2</sub>.

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  $\pi$  bonds in complexes. The law of Lambert and Beer, the selection rules of Laporte and the UV-Vis spectra. Bio-inorganic complexes: heme and the most common chemotherapy drugs.

## PROGRAMMA

**Modulo 0.** 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 Brønsted, 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.

**Modulo I.** 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 Clapeyron. Diagrammi di fase. Solubilità dei gas e 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.

**Modulo II.** 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, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, F<sub>2</sub>.

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 nei complessi. I simboli di termine spettroscopici. La legge di Lambert e Beer, le regole di selezione di Laporte e gli spettri UV-Vis dei complessi. I complessi bio-inorganici eme e chemioterapici più comuni.

---

#### TEXTBOOKS

General Chemistry, Raymond Chang

Inorganic Chemistry, Atkins

#### TESTI ADOTTATI

Chimica Generale, Raymond Chang

Chimica Inorganica, Atkins

---

#### EXAM METHOD

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).

#### MODALITA' D'ESAME

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).

Gli esami vanno sostenuti strettamente in sequenza (Modulo 0 → Modulo I → Modulo II).

---

#### EVALUATION

**Failed exam:** Poor or lacking knowledge and understanding of the topics; limited ability to analyze and summarize data and information, frequent generalizations of the requested contents; inability to use technical language.

**18-20:** Barely sufficient knowledge and understanding of the topics, with obvious imperfections; barely sufficient ability to analyze, summarize data and information, and limited autonomy of judgment; poor ability to use technical language.

**21-23:** Sufficient knowledge and understanding of the topics; sufficient ability to analyze, summarize data with the ability to reason with logic and coherence the required contents; sufficient ability to use technical language.

**24-26:** Fair knowledge and understanding of the topics; adequate ability to analyze and summarize data and information with ability to rigorously discuss the required contents; good ability to use technical language.

**27-29:** Good knowledge and understanding of the required contents; good ability to analyze and summarize data and information together with ability to rigorously discuss and present the required contents; good ability to use technical language.

**30-30L:** Excellent level of knowledge and understanding of the required contents with an excellent ability to analyze and synthesize data and information with the ability to discuss and present the required contents in a rigorous, innovative and original way; excellent ability to use technical language.

#### VALUTAZIONE

**Non idoneo:** Scarsa o carente conoscenza e comprensione degli argomenti; limitate capacità di analisi e sintesi, frequenti generalizzazioni dei contenuti richiesti; incapacità di utilizzo del linguaggio tecnico.

**18-20:** Appena sufficiente conoscenza e comprensione degli argomenti, con evidenti imperfezioni; appena sufficienti capacità di analisi, sintesi e autonomia di giudizio; scarsa capacità di utilizzo del linguaggio tecnico.

**21-23:** Sufficiente conoscenza e comprensione degli argomenti; sufficiente capacità di analisi e sintesi con capacità di argomentare con logica e coerenza i contenuti richiesti; sufficiente capacità di utilizzo del linguaggio tecnico.

**24-26:** Discreta conoscenza e comprensione degli argomenti; discreta capacità di analisi e sintesi con capacità di argomentare in modo rigoroso i contenuti richiesti; discreta capacità di utilizzo del linguaggio tecnico.

**27-29:** Buona conoscenza e comprensione dei contenuti richiesti; buona capacità di analisi e sintesi con capacità di argomentare in modo rigoroso i contenuti richiesti; buona capacità di utilizzo del linguaggio tecnico.

**30-30L:** Ottimo livello di conoscenza e comprensione dei contenuti richiesti con un'ottima capacità di analisi e sintesi con capacità di argomentare in modo rigoroso, innovativo e originale, i contenuti richiesti; ottima capacità di utilizzo del linguaggio tecnico.

---