



# UNIVERSITÀ DI PISA

---

## CHIMICA FISICA ORGANICA

**LAURA CARBONARO**

Academic year **2020/21**  
Course **CHIMICA**  
Code **184CC**  
Credits **3**

Modules	Area	Type	Hours	Teacher(s)
CHIMICA FISICA ORGANICA	CHIM/02	LEZIONI	24	LAURA CARBONARO

### Obiettivi di apprendimento

#### *Conoscenze*

Al termine del corso lo studente avrà acquisito le conoscenze per affrontare in maniera critica e quantitativa i problemi che riguardano la reattività e le proprietà chimico-fisiche di di molecole organiche

#### *Modalità di verifica delle conoscenze*

La verifica delle conoscenze avverrà attraverso quesiti posti durante le lezioni

#### *Capacità*

lo studente saprà applicare metodi qualitativi e semi-quantitativi per la descrizione della reattività delle molecole organiche.

#### *Modalità di verifica delle capacità*

verrà richiesto di applicare metodi qualitativi e semi-quantitativi per la descrizione e interpretazione della reattività di alcune molecole organiche.

#### *Comportamenti*

lo studente saprà analizzare in modo critico lo studio della reattività di molecole organiche

#### *Modalità di verifica dei comportamenti*

allo studente sarà proposto di tenere un breve seminario su una classe di reazioni

#### **Prerequisiti (conoscenze iniziali)**

Nozioni di chimica fisica, chimica organica.

#### **Programma (contenuti dell'insegnamento)**

Il legame chimico: VB e MO. Entalpia di legame. Reazioni chimiche: variazione di Entalpia, entropia e di G, costante di equilibrio. Dipendenza della velocità di reazione dalla temperatura: equazione di Arrhenius. Cinetica formale: Definizioni. Reazioni monofasiche con un elemento di reversibilità. Reazioni multifasiche. Nitrazione del benzene: ipotesi meccanicistiche e analisi cinetica. Trasformata di Laplace. Superfici di energia potenziale (PES). Principio di Hammond. Principio di Rice teller. Metodo di Burgi Dunnitz. Addizione al carbonile: traettoria di Burgi Dunnitz. Teoria delle velocità assolute. Equazione di Eyring: critiche. Parametri di attivazione. Esempio: determinazione della geometria del ciclobutadiene. regole di Thorton. Diagrammi di Jencks-O'Farrel: reazioni di sostituzione nucleofila e di eliminazione. Critiche alla teoria delle velocità assolute. Effetto isotopico: usi cinetici e non cinetici. Effetto isotopico primario. Effetto isotopico secondario. Effetto isotopico del solvente. Metodi di rilassamento Catalisi acida e basica, specifica e generale. Equazione di Bronsted. Esempi di reazioni acido e/o basico catalizzate. Equazione di Hammond. Equazione di Taft. Generalizzazioe delle relazioni extratermodinamiche. Orbitali di Hukel. Reazioni pericicliche. Regole di Woodward-Hoffmann.

#### **Bibliografia e materiale didattico**



## UNIVERSITÀ DI PISA

---

Meccanismi di reazione della Chimica organica, Alser; Baker, Brown. Piccini editore  
Physical organic Chemistry, Neil S. Isaacs. Longman Scientific & Technical

### Modalità d'esame

Esame orale.

*Ultimo aggiornamento 20/09/2020 11:50*