

MECCANISMI DELLE REAZIONI ORGANICHE

MECHANISM OF ORGANIC REACTIONS

A.A.	2025-2026	CdS	LAUREA MAGISTRALE IN CHIMICA
Codice	8067863	Canale	UNICO
CFU	6	Lingua	—

DOCENTE RESPONSABILE

Gianfranco Ercolani

OBIETTIVI FORMATIVI

Italiano	<p>OBIETTIVI FORMATIVI: L'insegnamento permette l'acquisizione delle conoscenze di base della chimica organica fisica attraverso lo studio della struttura dei composti organici e dei loro meccanismi di reazione con metodi computazionali (calcoli ab initio, semiempirici, di teoria del funzionale densità, e di meccanica molecolare) e sperimentali (metodi cinetici e non-cinetici, metodi termodinamici, e correlazioni lineari di energia libera)</p> <p>CONOSCENZA E CAPACITÀ DI COMPrensIONE: Lo studente conosce e comprende correttamente: i principi e le approssimazioni relative ai principali metodi computazionali per il calcolo dell'energia e della struttura di specie molecolari di equilibrio e di transizione, la teoria qualitativa dell'orbitale molecolare e le sue applicazioni in chimica organica, i metodi sperimentali per lo studio dei meccanismi delle reazioni organiche</p> <p>CAPACITÀ DI APPLICARE CONOSCENZA E COMPrensIONE: Lo studente è in grado di applicare le conoscenze acquisite alla soluzione di problemi meccanicistici in chimica organica sia con metodi sperimentali che computazionali</p> <p>AUTONOMIA DI GIUDIZIO: Lo studente è in grado di interpretare criticamente sia i dati computazionali che i dati sperimentali sulla base delle conoscenze acquisite, ed è in grado di formulare idee, problemi, e soluzioni originali</p> <p>ABILITÀ COMUNICATIVE: Al termine del corso lo studente sarà in grado di comunicare in modo chiaro e privo di ambiguità informazioni, idee, problemi e soluzioni inerenti alla chimica organica fisica sia a interlocutori specialisti che non specialisti. Tali abilità comunicative saranno sviluppate durante il corso sollecitando gli studenti a porre domande e a dare risposte, con un linguaggio consono alla disciplina, sia durante la lezione che nelle ore dedicate alle dimostrazioni pratiche in classe</p> <p>CAPACITÀ DI APPRENDIMENTO: Al termine del corso lo studente avrà sviluppato quelle capacità di apprendimento che gli permetteranno di saper leggere e comprendere testi e articoli scientifici di chimica organica fisica e meccanicistica, e di chimica organica computazionale</p>
Inglese	<p>LEARNING OUTCOMES: <i>The course allows the acquisition of the basic knowledge of physical organic chemistry through the study of the structure of organic compounds and their reaction mechanisms by</i></p>



	<p><i>computational methods (ab initio, semiempirical, density functional theory, and molecular mechanics calculations) and experimental methods (kinetic and non-kinetic methods, thermodynamic methods, and linear free energy correlations)</i></p> <p>KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING: <i>The student knows and correctly understands: the principles and the approximations underlying the main computational methods for calculating the energy and structure of equilibrium and transition molecular species, the qualitative molecular orbital theory and its applications in organic chemistry, the molecular symmetry, the experimental methods for the study of organic reaction mechanisms</i></p> <p>APPLYING KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING: <i>The student is able to apply the acquired knowledge to the solution of mechanistic problems in organic chemistry with both experimental and computational methods</i></p> <p>MAKING JUDGEMENTS: <i>The student is able to critically interpret both the computational and the experimental data on the basis of the acquired knowledge, and is able to formulate ideas, problems, and original solutions</i></p> <p>COMMUNICATION SKILLS: <i>At the end of the course the student will be able to communicate clearly and without ambiguity, information, ideas, problems and solutions concerning physical organic chemistry to both specialist and non-specialist interlocutors. These communication skills will be developed during the course, urging students to ask questions and give answers, in a language appropriate to the discipline, both during the lesson and in the hours devoted to practical demonstrations in the classroom</i></p> <p>LEARNING SKILLS: <i>At the end of the course the student will have developed those learning skills that will allow him to be able to read and understand scientific texts and articles on physical and mechanistic organic chemistry, and computational organic chemistry</i></p>
--	--

PREREQUISITI

Italiano	Conoscenza delle discipline chimiche di base con particolare riguardo ai fondamenti della chimica organica e della chimica fisica
Inglese	<i>Knowledge of basic chemical disciplines with particular regard to the fundamentals of organic chemistry and physical chemistry</i>

PROGRAMMA

Italiano	Metodi della Meccanica Molecolare. Esplorazione della superficie di energia potenziale. Analisi dei modi normali di vibrazione. Teoria dell'orbitale molecolare: metodi di Hückel e di Hückel esteso, approccio qualitativo. Metodi computazionali quanto-meccanici per lo studio dell'energia e della struttura di specie molecolari di equilibrio e di transizione (calcoli ab initio, semiempirici, e teoria del funzionale densità). Studio dei meccanismi di reazione con metodi non-cinetici. Termodinamica e cinetica delle reazioni organiche. Effetti isotopici. Catalisi Acida e Basica. Equazione di Brønsted. Teorie della cinetica chimica (teoria dello stato di transizione, principio di Bell-Evans-Polanyi, postulato di Hammond, teoria di Marcus). Correlazioni Lineari di Energia Libera.
Inglese	<i>Methods of Molecular Mechanics. Exploration of potential energy surface. Analysis of normal modes of vibration. Molecular orbital theory: Hückel and extended Hückel methods,</i>

	<i>qualitative approach. Quantum mechanical computational methods for the study of energy and structure of equilibrium and transition molecular species (ab initio, semiempirical, density functional theory calculations). Study of reaction mechanisms with non-kinetic methods. Thermodynamics and kinetics of organic reactions. Isotopic effects. Acid and Base Catalysis. Brønsted equation. Theories of chemical kinetics (transition state theory, Bell-Evans-Polanyi principle, Hammond postulate, Marcus theory). Linear Free Energy Correlations.</i>
--	--

TESTI ADOTTATI E BIBLIOGRAFIA

Italiano	1) Modern Physical Organic Chemistry; Eric V. Anslyn, Dennis A. Dougherty; Univ. Science Books, 2005 2) Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics, 3rd Ed. ; Errol G. Lewars; Springer-Verlag, 2016
<i>Inglese</i>	1) <i>Modern Physical Organic Chemistry; Eric V. Anslyn, Dennis A. Dougherty; Univ. Science Books, 2005</i> 2) <i>Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics, 3rd Ed.; Errol G. Lewars; Springer-Verlag, 2016</i>

MODALITÀ DI SVOLGIMENTO

Italiano	Il corso prevede 48 ore di lezioni frontali (6 CFU) che saranno svolte anche con l'ausilio di diapositive esplicative. Tali diapositive in formato digitale saranno fornite agli studenti ad integrazione della bibliografia di riferimento. Nel corso delle lezioni sarà anche dimostrato l'uso pratico di alcuni dei principali programmi computazionali. Sia le lezioni che le dimostrazioni in classe saranno svolte incoraggiando la partecipazione attiva degli studenti nella discussione e nella soluzione dei problemi
<i>Inglese</i>	<i>The course consists of 48 hours of lectures (6 Course Credits) which will also be carried out with the help of explanatory slides. These slides in digital format will be provided to students as a supplement to the reference bibliography. During the classes the practical use of some popular computational programs will also be demonstrated. Both the classes and the demonstrations in the classroom will be carried out encouraging the active student participation in the discussion and problem solving activity</i>

MODALITÀ DI VALUTAZIONE

Prova orale

Italiano	Lo scopo dell'esame è verificare il livello di raggiungimento dei risultati di apprendimento precedentemente indicati. L'esame consiste in un colloquio orale della durata di 45-60 minuti, volto a verificare le conoscenze acquisite e le capacità di comunicazione dello studente. Tipicamente vengono proposte tre domande su argomenti svolti. L'esame viene superato con un voto uguale o superiore a 18/30. Graduazione del voto dell'esame orale: 18-21, lo studente ha acquisito i concetti di base della disciplina e si esprime con un linguaggio sufficientemente corretto ed appropriato. 22-25, lo studente ha acquisito in modo approfondito i concetti di base della disciplina ed è adeguatamente in grado di effettuare i collegamenti tra le varie materie. Presenta linearità nella strutturazione del discorso. Il linguaggio è appropriato e corretto. 26-29, lo studente possiede un bagaglio di conoscenze completo e ben strutturato. È in grado di applicare e rielaborare autonomamente le conoscenze acquisite. Mette in evidenza una ricchezza di riferimenti e capacità logico-analitiche con un linguaggio fluido, appropriato e vario.
-----------------	--

	30 e 30 e lode, lo studente possiede una base di conoscenze completa e approfondita. È in grado di applicare la conoscenza a casi e problemi complessi ed estenderla a nuove situazioni. I riferimenti culturali sono ricchi e aggiornati. Si esprime con brillantezza e perfetta proprietà di linguaggio.
Inglese	<p><i>The aim of the exam is to verify the level of achievement of the previously indicated learning outcomes. The exam consists of an oral interview lasting 45-60 minutes, aimed at verifying the acquired knowledge and the student's communication skills. Typically, three questions are proposed on the topics covered. The exam is passed with a grade equal to or greater than 18/30.</i></p> <p><i>Graduation of the grade of the oral exam:</i></p> <p><i>18-21, the student has acquired the basic concepts of the discipline and expresses himself with a sufficiently correct and appropriate language.</i></p> <p><i>22-25, the student has acquired in depth the basic concepts of the discipline and is adequately able to make the connections between the various subjects. Presents linearity in the structuring of speech. The language is appropriate and correct.</i></p> <p><i>26-29, the student has a complete and well-structured set of knowledge. He is able to independently apply and re-elaborate the acquired knowledge. It highlights a wealth of references and logical-analytical skills with a fluid, appropriate and varied language.</i></p> <p><i>30 and 30 cum laude, the student has a complete and in-depth knowledge base. Is able to apply knowledge to complex cases and problems and extend it to new situations. The cultural references are rich and up-to-date. It expresses itself with brilliance and perfect language properties.</i></p>

MODALITÀ DI FREQUENZA

Frequenza facoltativa

Italiano	La frequenza del corso è facoltativa ma fortemente consigliata
Inglese	<i>Course attendance is optional but strongly recommended</i>