



# *Dipartimento di Scienze e Tecnologie*

**ANNO ACCADEMICO 2017/2018**

**CORSO di STUDIO in Biotecnologie  
INSEGNAMENTO di Chimica Fisica**

**DOCENTE: Prof. Giuseppe Graziano**

I e II principio della termodinamica. Ciclo di Carnot ed entropia di Clausius. Relazione di Boltzmann e significato statistico-molecolare di entropia. Teorema di equipartizione dell'energia per un gas ideale biatomico. Concetto di gradi di libertà di una molecola. Capacità termica e quantizzazione dei livelli energetici. Distribuzione di Boltzmann. Energia libera di Gibbs e spontaneità di un processo.

Gas reali: equilibrio liquido-gas. Modello di van der Waals. Transizioni di fase. Equazioni di Clapeyron e Clausius-Clapeyron. Transizione grafite-diamante. La denaturazione delle proteine globulari come una transizione di fase: misure DSC e curve di stabilità.

Principi di struttura delle proteine. Folding & unfolding della struttura nativa. Stabilità marginale. Entropia conformazionale della catena polipeptidica. Legami a idrogeno e forze dispersive (Lennard-Jones). Effetto idrofobico. Denaturazione calda e denaturazione fredda. Folding & mis-folding delle catene polipeptidiche. La ribonucleasi A ed il fenomeno del domain-swapping.

Grandezze parziali molari. Volume parziale molare. Potenziale chimico. Trattazione termodinamica dell'equilibrio chimico. Equilibri omogenei ed eterogenei. Dipendenza della costante di equilibrio dalla temperatura. Effetto della pressione sull'equilibrio chimico.

Soluzioni ideali: legge di Raoult e significato molecolare. Legge di Henry e solubilità dei gas in acqua. Pressione osmotica. Soluzioni non-ideali. Fenomeni di smiscelamento. Diffusione. I e II legge di Fick. Random walk.

Equilibri di dialisi e plot di Scatchard. Binding dell'ossigeno sulla mioglobina e sull'emoglobina. Trattazione termodinamica e concetto di cooperatività. Modello allosterico di Monod-Wyman-Changeux. Modello sequenziale di Koshland-Nemethy-Filmer. Concetto di funzione di ripartizione del sistema per la trattazione di questi modelli.

Onde elettromagnetiche: informazioni fondamentali e principio di sovrapposizione. I moti molecolari secondo la meccanica quantistica. Livelli elettronici, vibrazionali e rotazionali. Trattazione dell'oscillatore armonico classico e quantistico e modi normali di vibrazione.



# *Dipartimento di Scienze e Tecnologie*

Distribuzione di Boltzmann: le popolazioni dei vari livelli energetici. Interazione tra radiazione elettromagnetica e molecole. Regole di selezione nell'infrarosso. Emissione spontanea, emissione indotta ed assorbimento. Cosa è un laser.

Testi consigliati:

Chimica Fisica di Atkins e de Paula, Zanichelli.

Physical Chemistry: principles and applications in biological sciences di Tinoco, Sauer & Wang, 4<sup>th</sup> edition, Prentice Hall. Dispense delle lezioni del corso.