



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DI PADOVA



Bollettino Notiziario - A.A. 2021/2022

LAUREA MAGISTRALE IN CHIMICA (ORD. 2018)

Curriculum: Chemistry

FINALE EXAM

Titolare: da definire

Periodo: Il anno, annuale

Indirizzo formativo: Chemistry

Tipologie didattiche: ; 30,00

FRONTIERS IN CHEMICAL RESEARCH

Titolare: Prof.ssa CAMILLA FERRANTE

Periodo: Il anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Chemistry

Tipologie didattiche: ; 8,00

INTERNSHIP

Titolare: Prof.ssa CAMILLA FERRANTE

Periodo: Il anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Chemistry

Tipologie didattiche: ; 10,00

Curriculum: Chimica

BREVETTAZIONE, REGOLAMENTI E SVILUPPO DI PRODOTTI

Titolare: Dott. STEFANO MARETTO

Periodo: Il anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Chimica

Tipologie didattiche: +30E; 3,00

DIDATTICA DELLA CHIMICA

Titolare: Prof. MAURO SAMBI

Periodo: I anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Chimica

Tipologie didattiche: 32A+20E; 6,00

Prerequisiti:

Gli allievi dovranno avere una buona conoscenza degli argomenti trattati nei corsi di Chimica Generale del primo anno del corso di laurea delle Scuole di Scienze e di ingegneria.

Conoscenze e abilità da acquisire:

In questo insegnamento lo studente acquisirà le competenze necessarie per la progettazione di percorsi culturalmente significativi e didatticamente efficaci per l'insegnamento della Chimica a livello della scuola secondaria. In particolare, lo studente sarà in grado di: i) comprendere i tre livelli di rappresentazione della materia che operano nella chimica; ii) contestualizzare i principi generali della chimica nella loro prospettiva storica e epistemologica; iii) affrontare le principali difficoltà cognitive che gli allievi incontrano nell'apprendimento della chimica; iv) discriminare tra la pluralità di testi e materiale didattico reperibile anche in rete quello più adatto per gli scopi che ci si è prefissi; v) elaborare brevi percorsi didattici per l'apprendimento di argomenti di natura chimica in coerenza con gli obiettivi fissati dalle indicazioni nazionali e dalle linee guida. vi) usare un approccio trans- e interdisciplinare nell'insegnamento della disciplina che espliciti il ruolo della chimica nella società attuale.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

lezioni frontali

Contenuti:

A partire da un approccio storico ed epistemologico della chimica l'insegnamento affronta i fondamenti della didattica della disciplina considerando i principali quadri teorici sviluppati per la progettazione di metodologie di insegnamento e di apprendimento della chimica e per la costruzione di percorsi didattici aperti allo studio del rapporto della chimica con la società. Introduzione di Storia ed Epistemologia della Chimica – La Chimica dal mondo preistorico alla cultura alchemica. – La prima rivoluzione chimica: Chimica dei sistemi macroscopici e Lavoisier – La seconda rivoluzione chimica: atomi e molecole – La Tavola Periodica degli Elementi: storia, epistemologia ed utilizzo didattico Didattica della Chimica – I contenuti chimici nelle linee guida per la scuola secondaria – La rappresentazione della materia in chimica: il triangolo di Johnstone (i tre livelli di rappresentazione della materia); la struttura logica della chimica e la sua implicazione nell'insegnamento e apprendimento della disciplina – Natura e origini delle concezioni errate in chimica – Il ruolo dell'insegnante nella progettazione dei percorsi di apprendimento. – La didattica laboratoriale come metodologia per l'apprendimento della chimica: ruolo ed esempi operativi nella preparazione delle unità didattiche. – Studio dei processi di insegnamento e apprendimento della chimica mediante diversi strumenti e tecnologie: strumenti per l'ascolto attivo; strumenti per il feedback; la classe rovesciata; il gioco. Analisi dell'efficacia degli strumenti didattici multimediali per la comprensione della chimica.

Modalità di esame:

La verifica dell'apprendimento avverrà attraverso un esame orale costituito da una breve presentazione di una unità didattica sviluppata dallo studente. Nell'esame orale sarà anche verificata la conoscenza da parte dello studente degli argomenti spiegati nell'insegnamento.

Criteri di valutazione:

La presentazione dell'unità didattica sarà valutata in base alla contestualizzazione dell'argomento relativamente alla platea cui è rivolta e al punto del programma in cui si inserisce; alla coerenza della terminologia e dei concetti utilizzati con il livello di conoscenze e competenze dei fruitori; all'efficacia del linguaggio e degli strumenti didattici utilizzati; al livello di apprendimento e di valutazione critica dei concetti nel corso dell'insegnamento.

Testi di riferimento:

Valentina Domenici, Insegnare e apprendere la chimica. Milano: Mondadori Università, 2018
Laura Cipolla, Metodi e strumenti per l'insegnamento e l'apprendimento della chimica. Napoli: EDISES, 2014
Javier Garcia-Martinez, Elena Serrano-Torregrosa (Eds.), Chemistry Education: Best Practices, Opportunities and Trends. Weinheim: Wiley-VCH, 2015

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Materiale didattico fornito dai docenti sul sito Moodle di Dipartimento.

ENGLISH LANGUAGE B2 (PRODUCTIVE SKILLS)

Titolare: Prof.ssa CAMILLA FERRANTE

Periodo: Il anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Chimica

Tipologie didattiche: ; 3,00

PROVA FINALE

Titolare: da definire

Periodo: Il anno, annuale

Indirizzo formativo: Chimica

Tipologie didattiche: ; 40,00

TIROCINIO FORMATIVO

Titolare: Prof.ssa CAMILLA FERRANTE

Periodo: Il anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Chimica

Tipologie didattiche: ; 5,00

Curriculum: Corsi comuni

CHEMISTRY OF ORGANIC MATERIALS

Titolare: Prof. ENZO MENNA

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:

È opportuno che lo studente abbia superato gli esami di Chimica Organica I, II e III.

Conoscenze e abilità da acquisire:

Alla fine del corso gli studenti dovrebbero aver: a) familiarizzato con la struttura delle molecole organiche più utilizzate nel campo della chimica dei materiali e conosciuto e compreso le metodologie di sintesi principali per la loro preparazione; b) capito i principi che governano la reattività chimica di tali molecole; c) conosciuto e compreso le applicazioni più recenti di tali molecole nel campo della chimica dei materiali.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

Lezioni frontali

Contenuti:

Il corso tratta le principali tipologie di applicazione dei materiali organici innovativi. Per ogni ambito applicativo vengono discusse - le basi teoriche necessarie a comprendere le funzioni svolte dal materiale - le diverse classi di composti impiegati - le diverse tipologie strutturali (polimeri, oligomeri, molecole, sistemi supramolecolari e nanostrutture) - sintesi e caratterizzazione di tali strutture - rapporto tra struttura e proprietà (ad es. effetti dei sostituenti, dell'organizzazione supramolecolare, etc.) - tecniche di realizzazione dei dispositivi (es. realizzazione di strati sottili, di sistemi autoorganizzati, etc.) - esempi di applicazioni sia a livello sperimentale che commerciale. Seguendo lo schema esposto vengono trattati in particolare i seguenti argomenti: Fullereni, nanotubi e nanostrutture di carbonio. Dispositivi fotovoltaici a base organica. Materiali organici elettroluminescenti (OLED). Polimeri supramolecolari. Strati auto-organizzati di molecole organiche. Molecole organiche per l'ottica non lineare. Materiali innovativi biomimetici: adesivi "a secco" (effetto gecko), materiali auto-riparanti. Materiali organici strutturali: rassegna delle principali classi di polimeri, loro impiego, sintesi e proprietà.

Modalità di esame:

Orale in lingua Italiana o Inglese a scelta dello studente, della durata di 20-30 minuti. Si chiede allo studente di esporre in modo conciso e rigoroso alcuni argomenti trattati e di collegare tra loro i concetti coinvolti.

Criteri di valutazione:

Comprensione degli aspetti della chimica organica che rendono possibile la progettazione, sintesi e caratterizzazione dei materiali trattati nel corso.

Testi di riferimento:

CONTENUTO NON PRESENTE

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Saranno fornite agli studenti dispense e rassegne di letteratura sugli argomenti trattati.

CHIMICA ANALITICA DEGLI INQUINANTI

Titolare: Prof.ssa SARA BOGIALLI

Mutuato da: Scuola Galileiana di Studi Superiori - Classe di Scienze Naturali

Periodo: Il anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 40A+12L; 6,00

Prerequisiti:

Non sono previste propedeuticità. Tuttavia, per la frequenza del presente insegnamento sono fondamentali le conoscenze acquisite nei corsi di Chimica Analitica e di Chimica Ambientale I del Corso di Laurea Triennale.

Conoscenze e abilità da acquisire:

In relazione alle principali norme comunitarie e nazionali in materia ambientale, in particolare quelle riguardanti la qualità dell'aria e delle acque, il corso introduce gli studenti alle principali tecniche e metodiche di campionamento ed analisi impiegate nello studio dei processi e delle matrici ambientali. In particolare il corso verterà su: - Introduzione alle problematiche e ai processi ambientali. - Elementi di legislazione EU e IT. - Tecniche e Metodologie di analisi di matrici ambientali.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

Lezioni d'aula, esemplificazione di alcuni dettagli strumentali, dimostrazioni del funzionamento di alcune strumentazioni. Per CHIMICA DEGLI INQUINANTI: esercitazioni di laboratorio che prevedono campionamento, preparazione del campione e determinazione di parametri chimici in campioni ambientali. Uso di tecniche cromatografiche, mass spettrometriche, analisi elementari (LC-UV/FLD; LC-MS; GC-MS, ICP-OED, etc.)

Contenuti:

Per CHIMICA AMBIENTALE 2 il corso è diviso in due moduli. Il corso mutuato di ANALISI DEGLI INQUINANTI (6 CFU) comprende il secondo modulo (4 CFU) + 1 CFU di laboratorio con esperienze di analisi strumentale applicate a tematiche ambientali. Il primo modulo del corso (24 ore di lezione, 3 CFU, docente: prof. Andrea Tapparo) riguarda i principali parametri di qualità dell'aria e la loro misura: - L'inquinamento atmosferico e la rete di monitoraggio della qualità dell'aria. - Gli analizzatori automatici per la misura dell'inquinamento atmosferico. - L'origine, le proprietà e le tecniche di misura del particolato atmosferico. - L'inquinamento negli ambienti di lavoro e la tutela della salute dei lavoratori. - Tecniche e metodologie di monitoraggio ambientale. - Fonti di energia, inquinamento atmosferico e cambiamenti climatici. Il secondo modulo (32 ore di lezione, 4 CFU, docente: prof.ssa Sara Bogialli) è dedicata all'inquinamento delle acque: -Chimica dell'ambiente acquatico -Macroinquinanti e microinquinanti dell'ambiente idrico: composti organici, metalli, inquinanti emergenti. Fonti di inquinamento, aspetti tossicologici e normativi. -Classificazione delle acque e metodologie per la determinazione dei principali parametri chimici e biologici. -Processi di trattamento delle acque reflue e potabili -Valutazione e gestione del rischio relativa ai principali inquinanti 1 cfu è dedicato ad esercitazioni di laboratorio riguardanti strumentazione per analisi di inquinanti

Modalità di esame:

Orale. Nel caso di attività di laboratorio, è richiesta la consegna delle relative relazioni almeno 10 giorni prima dell'esame e non oltre le tre settimane successive alla conclusione delle attività. Le esperienze di laboratorio sono invariabilmente argomento di esame.

Criteri di valutazione:

Livello di comprensione dei principi chimico-fisici alla base dei fenomeni studiati. Conoscenza dei principi e dei dettagli strumentali delle strumentazioni illustrate nel corso. Conoscenza della terminologia tecnico-scientifica propria della materia. Capacità di razionalizzare le informazioni apprese per sintetizzarle in un unico quadro di analisi delle problematiche ambientali.

Testi di riferimento:

C. Baird, M. Cann, Chimica Ambientale, 3a Ed. italiana. : Zanichelli, 2013 S. E. Manahan, Chimica dell'ambiente. : Piccin, 2000

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Libri di testo consigliati Appunti di lezione. Materiale didattico fornito dal docente o disponibile presso il sito web dei docenti e/o moodle

CHIMICA ANALITICA E AMBIENTE

Titolare: Prof. ANDREA TAPPARO

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:

Per la frequenza al corso, anche nella modalità a distanza (on-line) offerta nel 2021, nonché per la preparazione dell'esame, fondamentali risulteranno le conoscenze di Chimica Analitica 1 e Chimica Analitica 2. In pratica, l'intero contenuto dei corsi di Chimica Analitica offerto nella Laurea Triennale in Chimica o Chimica Industriale costituisce prerequisito.

Conoscenze e abilità da acquisire:

A partire dalle principali norme comunitarie e nazionali in materia ambientale, il corso introduce gli studenti alle principali tecniche e metodiche di campionamento ed analisi impiegate nello studio dei processi e delle matrici ambientali, con particolare attenzione alle problematiche legate all'inquinamento atmosferico. In particolare il corso prevede: - Introduzione alle problematiche e ai processi ambientali - Fenomeni ed effetti locali e/o globali - Elementi di legislazione EU e IT di pertinenza ambientale - Tecniche e Metodologie di analisi di matrici ambientali - Analisi di particelle - Elementi di valutazione del rischio

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

Lezioni d'aula, esemplificazione di alcuni dettagli strumentali, dimostrazioni del funzionamento di alcune strumentazioni. Alcuni tipi di misurazioni ambientali verranno presentate con esempi reali e casi studio. Alcune strumentazioni portatili verranno portate ed utilizzate in aula.

Contenuti:

Il corso (48 ore di lezione, 6 CFU) si caratterizza per una serie di argomenti tutti inerenti la qualità dell'aria e la contaminazione atmosferica. Questa è trattata sia in ottica locale (è il caso del PM) che globale (effetto serra): - l'atmosfera, struttura e proprietà; - la chimica della stratosfera e la riduzione dello strato di ozono; - la chimica della troposfera e l'inquinamento atmosferico; - la rete di monitoraggio della qualità dell'aria; - gli analizzatori automatici per la misura dell'inquinamento atmosferico; - l'origine, le proprietà e le tecniche di misura del particolato atmosferico; - gli analizzatori automatici di particelle; - i cicli biogeochimici, con particolare riferimento al ciclo del carbonio; - le conseguenze ambientali della produzione di energia, con particolare riferimento all'effetto dei gas-serra sul cambiamento climatico in atto; - i protocolli internazionali (Kyoto e Montreal); - l'inquinamento in ambiente industriale e la tutela della salute dei lavoratori (TLV); - esempi di tecniche di monitoraggio ambientale.

Modalità di esame:

La prova d'esame avverrà in modalità orale. Tipicamente verranno formulate 3 domande sugli argomenti trattati nel corso, di cui almeno una riguardante gli aspetti analitico-strumentali. Lo studente, nei casi previsti (disabilità, difficoltà con la lingua italiana), potrà richiedere di sostenere l'esame in forma scritta o in inglese.

Criteri di valutazione:

Livello di comprensione dei principi chimico-fisici alla base dei fenomeni ambientali studiati. Conoscenza dei principi e dei dettagli strumentali delle strumentazioni illustrate nel corso. Conoscenza della terminologia tecnico-scientifica propria della materia. Capacità di utilizzo dei principi e concetti appresi nel corso alle situazioni di reale contaminazione ambientale.

Testi di riferimento:

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Appunti di lezione. Materiale didattico fornito dal docente o disponibile presso il moodle del corso:
<https://elearning.unipd.it/chimica/course/view.php?id=929>

CHIMICA BIO-INORGANICA

Titolare: da definire

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:

CONTENUTO NON PRESENTE

Conoscenze e abilità da acquisire:

CONTENUTO NON PRESENTE

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

CONTENUTO NON PRESENTE

Contenuti:

CONTENUTO NON PRESENTE

Modalità di esame:

CONTENUTO NON PRESENTE

Criteri di valutazione:

CONTENUTO NON PRESENTE

Testi di riferimento:

CONTENUTO NON PRESENTE

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

CONTENUTO NON PRESENTE

CHIMICA BIO-ORGANICA

Titolare: Prof.ssa MARINA GOBBO

Periodo: Il anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:

E' opportuno che lo studente abbia acquisito nella laurea triennale le conoscenze di base della Chimica Organica.

Conoscenze e abilità da acquisire:

Il corso di chimica bio-organica affronta argomenti all'interfaccia tra la chimica organica, la biochimica, la chimica farmaceutica e le biotecnologie. Lo studente acquisirà le competenze necessarie per preparare e modificare con metodologie di tipo chimico peptidi e proteine per applicazioni in ambito farmaceutico e biotecnologico, anche in contesti innovativi (sensoristica e nanotecnologie).

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

Le lezioni frontali saranno intervallate da esercizi in classe e attività di problem solving da svolgersi singolarmente e in gruppo.

Contenuti:

Amminoacidi: Generalità e classificazioni. Proprietà chimiche, chimico-fisiche e spettroscopiche. Reazioni degli amminoacidi. Metodi generali di sintesi chimica con cenni alle sintesi industriali, asimmetriche e alla risoluzione dei racemati. Peptidi: metodi e tecniche per la determinazione della struttura primaria e cenni agli elementi di struttura secondaria delle catene polipeptidiche. Principi di sintesi peptidica. Gruppi protettori delle funzioni amminica, carbossilica e delle funzioni in catena laterale: principali metodi di introduzione e di rimozione dei gruppi protettori. Concetto di ortogonalità nella scelta dei gruppi protettori. Principali metodi di attivazione della funzione carbossilica: considerazioni generali e valutazione del metodo di attivazione. Tattica e strategia di sintesi in soluzione e su supporto solido. Reazioni secondarie nella sintesi dei peptidi e associate a specifici amminoacidi o sequenze peptidiche. Strategia di sintesi di peptidi ciclici, omodetici ed eterodetici. Uso di tecniche di ligazione nella sintesi di peptidi complessi e proteine. Tecniche di bio-coniugazione nella modifica di proteine e nella funzionalizzazione di sistemi nanostrutturati. Bioconiugazione con formazione di legami covalenti (naturali e non) e attraverso interazioni non-covalenti.

Modalità di esame:

Orale

Criteri di valutazione:

La valutazione della preparazione dello studente si baserà sulla comprensione degli argomenti svolti, sulla chiarezza espositiva, sull'acquisizione dei concetti e delle metodologie proposte e sulla capacità di applicarli in modo autonomo e consapevole in casi reali.

Testi di riferimento:

Hermanson, Greg T., Bioconjugate Techniques, 3rd ed. Elsevier: Inc., 2013 P. Lloyd-Williams, F. Albericio, Chemical approaches to the synthesis of peptides and proteins. : CRC Press LLC, 1997 A.B. Hughes, Amino Acids, Peptides and Proteins in Organic Chemistry. : Wiley-VCH, 2009

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Gli argomenti del corso sono trattati in diversi libri a disposizione in biblioteca. Per la preparazione dell'esame sono sufficienti le diapositive utilizzate a lezione, messe a disposizione sulla piattaforma di e-learning, unitamente agli appunti di lezione. Materiale aggiuntivo, ad es reviews ed articoli scientifici su argomenti specifici oggetto di discussione in classe, verranno rese disponibili in piattaforma.

CHIMICA DEI MATERIALI INORGANICI

Titolare: Prof.ssa ANTONELLA GLISENTI

Mutuato da: Laurea magistrale in Scienza dei Materiali (Ord. 2015)

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 40A+12L; 6,00

Prerequisiti:

Chimica Generale e Chimica Inorganica.

Conoscenze e abilità da acquisire:

Principi di chimica dello stato solido. Capacità di prevedere e correlare la struttura e le proprietà di alcune classi di materiali inorganici. Conoscenza dei principali approcci sintetici innovativi nella chimica dei materiali e dei fattori che regolano le proprietà funzionali dei solidi.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

Lezioni in aula, svolte attraverso l'impiego di diapositive per la schematizzazione dei contenuti e la discussione dei concetti che richiedono la rappresentazione delle strutture dei solidi. Partecipazione a seminari specialistici.

Contenuti:

1. Descrizione e struttura dei materiali inorganici: principi di cristallografia, tipi di solidi (cristallini, amorfi, polimerici e nanodimensionali), ruolo dei difetti nei solidi reali. 2. Termodinamica delle interfasi e trasformazioni nei solidi. Nucleazione e crescita. Reazioni all'interfaccia. 3. Materiali e superfici. Materiali porosi (mesoporosi, zeoliti, aerogel). 4. Correlazioni tra composizione, struttura, proprietà e funzionalità. 5. Processi di sintesi innovativi: processi da soluzione (tecniche sol-gel, idrotermale), processi da fase vapore (vapore-solido, CVD, PVD, MBE), processi aerosol, metodi di sintesi per combustione, reazioni allo stato solido, reazioni di intercalazione. 6. Tecniche di analisi spettroscopiche e microscopiche avanzate per lo studio dei materiali. 7. Proprietà catalitiche e fotocatalitiche, sensoristiche, ottiche, elettriche di vari materiali inorganici (spinelli, perovskiti, silicati, composti di intercalazione, polimeri inorganici e ibridi organico-inorganici, materiali vetrosi e ceramici, architetture metallo-supramolecolari discrete ed estese). Durante le esercitazioni di laboratorio verranno preparati e caratterizzati materiali inorganici utilizzando alcune delle tecniche di sintesi e caratterizzazione illustrate nel corso d'aula. In particolare si svilupperanno materiali per applicazioni nell'ambito della degradazione di inquinanti e con specifiche proprietà fotofisiche.

Modalità di esame:

La prova di esame consiste in una presentazione orale, della durata di circa 45 min., che comprende tipicamente: i) esposizione di un argomento a scelta del candidato; ii) descrizione di una o più tecniche di sintesi di materiali inorganici; iii) descrizione di una o più tecniche di caratterizzazione di materiali inorganici;

Criteri di valutazione:

Criteri di valutazione sono la chiarezza espositiva, la proprietà di linguaggio e il rigore nella presentazione degli argomenti, il grado di approfondimento degli argomenti, la capacità di stabilire correlazioni tra la composizione, la struttura e le proprietà funzionali dei materiali inorganici studiati.

Testi di riferimento:

Anthony R. West, Solid State Chemistry and its Applications. : John Wiley & Sons, 2014 G. Granozzi, Chimica dello Stato Solido e delle Superfici. Padova: Cleup, 1999 L. Smart, E. Moore, Solid State Chemistry. An Introduction., : Chapman & Hall, 1995 Ulrich Schubert, Nicola Husing, Synthesis of Inorganic Materials. : John Wiley & Sons, 2005

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Lucidi di Lezione, Dispense, articoli scientifici

CHIMICA DELLE SUPERFICI E DELLA CATALISI

Titolare: Prof. GAETANO GRANOZZI

Periodo: Il anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:

Concetti base di termodinamica e cinetica chimica Concetti di base sulla diffusione

Conoscenze e abilità da acquisire:

Descrizione delle proprietà dei solidi e delle loro superfici Cristallografia in due dimensioni Colloidi ed interfacce Visione microscopica dei processi catalitici eterogenei

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

Attività di aula e visite ai laboratori

Contenuti:

- Richiami di struttura dei solidi. Reticoli e strutture inorganiche di rilevanza in campo catalitico. Concetti di base di cristallografia. Solidi monocristallini, policristallini ed amorfi. Cenni sulla difettualità dei solidi. -Introduzione alle Interfasi. Importanza tecnologica delle superfici. Cenni storici sulla Surface Science. Strati sottili. Energia interfacciale e termodinamica delle interfasi. Solidi dispersi e area superficiale. Colloidi e dispersioni. Tensioattivi. -Superfici ideali e superfici reali Cristallografia di superficie: reticolo diretto e reciproco. Rilassamento e ricostruzioni superficiali. Notazioni sulle ricostruzioni di superficie. Metodologie per lo studio strutturale delle superfici: Low Energy Electron Diffraction (LEED). Cristallografia. Difetti superficiali. Rugosità e morfologia di superficie. Metodologie per lo studio morfologico delle superfici: Atomic Force Microscopy (AFM). Effetto tunnel e Scanning Tunneling Microscopy (STM). Interfase solido-vuoto e solido-gas. Metodi di produzione ed uso del vuoto in Scienza delle Superfici. Richiami di teoria cinetica dei gas. Sticking coefficient. Calcolo del tempo di vita medio di una superficie pulita. Chemisorbimento e fisisorbimento. Interazioni interadsorbato. Isoterme di adsorbimento. Desorbimento. Desorbimento termico programmato (TPD). Interfase solido-solido: Epitassia. Meccanismi di crescita degli strati sottili e processi elementari atomici connessi. Molecular Beam Epitaxy (MBE). Metodologie per la creazione di nanostrutture superficiali: film ultrasottili, nanodots, nanowires. Metodi spettroscopici per lo studio delle superfici Sensibilità di superficie. Processi di scattering fotone-atomo, elettrone-atomo e ione-atomo. Spettroscopie di fotoelettroni e di ioni. Spettroscopie vibrazionali (IRAS e HREELS). Reattività delle superfici. Mobilità delle specie adsorbite. Cinetica delle reazioni in superficie. Paragone tra reazioni in fase omogenea ed eterogenea. Esame di alcune reazioni superficiali.

Modalità di esame:

Orale (3 domande per un totale di circa mezzora)

Criteri di valutazione:

La valutazione della preparazione dello studente si baserà sulla comprensione degli argomenti di lezione, sull'acquisizione dei concetti e delle metodologie proposte e sulla capacità di applicarli in modo autonomo e consapevole

Testi di riferimento:

G. Granozzi, appunti di lezione. ; E. M. McCash, Surface Chemistry. : Oxford University Press, 2001 K. Kolasinski, Surface Science. : John Wiley & Sons, 2002 Shriver and Atkins, Inorganic Chemistry. : Oxford University Press, 1999

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Dispense e lucidi messi a disposizione degli studenti

CHIMICA FISICA 4

Titolare: Prof.ssa ALBERTA FERRARINI

Periodo: I anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 64A+10E+12L; 10,00

Prerequisiti:

Matematica: trigonometria, vettori, derivate, integrali. Fisica: concetti di basi di elettrostatica (carica, potenziale elettrostatico, campo elettrico); onde elettromagnetiche. Termodinamica: principi, potenziali termodinamici. Elementi e operazioni di simmetria, gruppi puntuali di simmetria. Meccanica quantistica: equazione di Schrodinger, modelli di particella nella scatola, rotatore rigido, oscillatore armonico, approssimazione di Born-Oppenheimer.

Conoscenze e abilità da acquisire:

Fornire agli studenti i concetti e gli strumenti metodologici di base per l'interpretazione a livello molecolare delle proprietà di macroscopiche della materia (prima parte). Cinetica chimica, cinetica elettrochimica e trasferimento elettronico (seconda parte).

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

Lezioni frontali e esercitazioni di laboratorio.

Contenuti:

Prima parte Fondamenti di termodinamica statistica: distribuzioni di probabilità, ensemble statistici, statistica di Boltzmann, distribuzione delle velocità di Maxwell, equipartizione dell'energia. Applicazioni: proprietà termodinamiche di gas perfetto, capacità termica di solidi. Cenni alla struttura dei liquidi. Proprietà elettriche delle molecole (momento di dipolo e momenti di ordine superiore, polarizzabilità) e loro relazione con le proprietà dielettriche della materia. Applicazioni: costante dielettrica di liquidi, contributo elettrostatico all'energia libera di solvatazione. Interazioni intermolecolari: interazioni di coppia e loro espressioni in termini di grandezze molecolari. Applicazioni: energia reticolare di cristalli ionici. Le esercitazioni riguarderanno applicazioni dei metodi sviluppati nella parte teorica del corso. Seconda parte Cinetica chimica: dopo aver richiamato i concetti base, si discute l'effetto della temperatura sulle reazioni chimiche e l'equazione di Arrhenius. Si trattano quindi: la teoria delle collisioni e quella dello stato di transizione; le varie modalità di trasporto di massa; catalisi omogenea ed eterogenea. Un'altra parte del corso riguarda la cinetica elettrochimica, con particolare attenzione al controllo da parte del trasporto di massa e del trasferimento di carica. L'applicazione di tali concetti è condotta in relazione ai metodi elettrochimici più diffusi. Si introduce infine: la teoria di Marcus del trasferimento elettronico, e successive modifiche quanto-meccaniche; effetto della distanza sui trasferimenti elettronici; applicazioni della teoria del trasferimento elettronico a sistemi reali. Nelle esercitazioni di laboratorio si faranno esperimenti atti ad approfondire dal punto di vista pratico i temi suddetti.

Modalità di esame:

Prove scritte ed orali, nonché partecipazione attiva al corso ed alle esercitazioni. La prova orale consiste in tre domande aperte, una sulla termodinamica statistica e le altre su due degli argomenti trattati nella prima parte del corso. Nei test scritti si valuterà la preparazione su singole porzioni della seconda parte del corso, in modo da favorire un apprendimento immediato e progressivo dei contenuti delle lezioni.

Criteri di valutazione:

La valutazione dello studente si baserà su capacità di esposizione, rigore delle dimostrazioni, approfondimento degli argomenti e capacità di applicarli concetti e metodi in modo consapevole ed autonomo.

Testi di riferimento:

A. J. Bard, L. R. Faulkner, Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications. : Wiley, 2001 Atkins, P. W.; Keeler, James Henry, Atkins' physical chemistry Peter Atkins, Julio De Paula, James Keeller. Oxford: Oxford university press, 2018

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Materiale didattico (dispense e copia di diapositive), sarà fornito dai docenti.

CHIMICA INORGANICA 3

Titolare: Prof.ssa SILVIA GROSS

Periodo: I anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 56A+36L; 10,00

Prerequisiti:

Conoscenze di termodinamica e termochimica. Energia libera di Gibbs, entalpia, entropia. Conoscenze di base di chimica dei polimeri. Corsi fondamentali della Laurea in Chimica, con particolare riferimento ai contenuti dei corsi di Matematica, Chimica.

Conoscenze e abilità da acquisire:

Il corso vuole offrire un'introduzione a moderni approcci di sintesi di materiali inorganici, contestualizzandoli in tre diverse grandi classi: i.) approcci sintetici da fase gas; ii.) approcci sintetici in stato solido; iii.) approcci sintetici da soluzione/sospensione, con enfasi particolarmente alla terza classe. Il corso di prefigge quindi di fornire agli studenti gli strumenti metodologici e teorici per comprendere i principi fisici, le caratteristiche principali, i vantaggi, i limiti, la scalabilità di vari approcci sintetici e la loro potenziale applicabilità in ambito industriale. Vari dei metodi descritti a lezione verranno poi utilizzati nella parte di laboratorio. La panoramica sulle metodologie di sintesi verrà integrata da una breve introduzione ad approcci metodologici di tipo teorico finalizzati ad una razionale e sostenibile progettazione di una sintesi, ovvero il Design of Experiment (DoE). Verranno introdotte la chimica descrittiva e sistematica degli elementi del blocco f e le basi dei metodi di raggi X come strumenti per l'analisi dei materiali inorganici. Inoltre, una parte teorica del corso, fornirà allo studente gli strumenti metodologici per affrontare la parte teorica relativa al corso (teoria dei gruppi e alle proprietà elettroniche del gruppo dei lantanidi).

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

Didattica frontale. Lucidi Power Point. Esercizi guidati di DoE.

Contenuti:

Parte 1: Introduzione alla moderna sintesi di materiali inorganici: principali classi di approcci e strumenti metodologici di supporto alla sintesi (1 CFU) • Introduzione alla moderna sintesi di nanomateriali inorganici e loro principali ambiti di applicazione • Parte descrittiva relativa agli elementi del blocco 4f (lantanoide) • Metodi di sintesi da stato solido (meccanosintesi, riduzione carbotermica, sintesi da combustione, metodo ceramico) • Formazione di solidi da fase gas (processo aerosol, spray pyrolysis, cenni sul metodo CVD) • Formazione di solidi da fase liquida: nucleazione e crescita, modello di La Mer, teorie classiche e non classiche di cristallizzazione Parte 2: Approcci di sintesi da fase liquida (soluzioni, sospensioni) Strategie generali di sintesi di sistemi inorganici: metodi di dispersione, metodi di nucleazione/crescita. • Tipologie principali di materiali inorganici (MOF e polimeri di coordinazione, nanostrutture, materiali massivi, colloidali) • Nucleazione da soluzione e seeded growth • Sintesi idro- e solvotermale (subcritiche e supercritiche) • Sintesi assistita da polioili • Sintesi assistita da microonde • Sintesi assistita da laser e metodi sonochimici e radiochimici • Sintesi in flusso e microfluidica • Sintesi in spazio confinato: microemulsioni, miniemulsioni • Sintesi assistita da templanti: materiali porosi • Sintesi biogeniche • Approcci al controllo morfologico e dimensionale Parte 3: Interazioni raggi X-materia e principali applicazioni analitiche • Natura, caratteristiche e generazione dei raggi X • Principi chimico-fisici dell'interazione RX-materia (assorbimento, trasmissione, diffrazione, diffusione, fotoemissione) • Principi di base ed approcci sperimentali in una selezione di metodi basati sui raggi X: XRD, XAS, XPS e XRF. • Analisi di un diffrattogramma di raggi X (cfr. esperienze di laboratorio) Parte 4: Introduzione alla teoria dei gruppi e proprietà elettroniche dei Lantanidi • Introduzione alla teoria dei gruppi: introduzione alla simmetria molecolare. Elementi e operazioni di simmetria, rappresentazioni irriducibili, tavole dei caratteri, gruppi puntali) • Applicazioni delle teoria dei gruppi a specifici sistemi inorganici • I diagrammi di Orgel in stretto collegamento con le esperienze di laboratorio • Struttura elettronica e proprietà dei Lantanidi: le difficoltà nel trattare sistemi con elettroni negli orbitali f. Parte 5: Lezioni propedeutiche al laboratorio didattico • Linea da vuoto (Schlenk): procedure e misure di sicurezza • Fotopolimerizzazione assistita da UV • Uso di reattori idrotermali • Liquidi criogenici • Descrizione delle esperienze di laboratorio Parte 6: Esperienze di laboratorio (3 CFU) Le esperienze di laboratorio si propongono di mettere in pratica sperimentalmente alcuni metodi di sintesi e caratterizzazione di composti inorganici illustrati nelle lezioni d'aula. Le attività riguardano sintesi di materiali inorganici in atmosfera inerte, assistita da microonde o idrotermale. Sintesi da soluzione di complessi inorganici e colloidali.

Modalità di esame:

Prova scritta costituita da domande aperte e domande a scelta multipla

Criteri di valutazione:

Lo studente dovrà dimostrare di aver acquisito le nozioni fondamentali fornite a lezione per comprendere i principi, l'effettiva applicabilità e i limiti dei vari approcci, ed utilizzare tali nozioni anche per elaborare nuove strategie di sintesi. In questo contesto, criteri di valutazione saranno il rigore scientifico nella descrizione dei vari approcci, la proprietà ed il rigore terminologico, il grado di approfondimento degli argomenti. Esame scritto (70% del voto finale). Valutazione del laboratorio (30% del voto finale).

Testi di riferimento:

R. L. Carter, Molecular Symmetry and Group Theory. New York: John Wiley & Sons, 1998 U. Schubert, N. Huesing, Synthesis of inorganic materials, IV Edition. Weinheim: Wiley VCH, 2020 G. L. Miessler, P. J. Fischer and D. A. Tarr, Inorganic Chemistry, 5th ed.. New York: Upper Saddle River, NJ: Pearson Prentice Hall., 2014 S. F. A. Kettle, Physical Inorganic Chemistry. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 1996 Ed. D. Thomson, Insight into Speciality Inorganic Chemicals. : RSC, 1995

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Appunti e presentazioni powerpoint di lezione, articoli e review indicati dal docente.

CHIMICA ORGANICA 4

Titolare: Prof.ssa MARCELLA BONCHIO

Periodo: I anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A+10E+36L; 10,00

Prerequisiti:

Corsi di Chimica Organica fondamentali

Conoscenze e abilità da acquisire:

Disegno e interpretazione della reattività in chimica organica

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

lezioni frontali e di laboratorio in stretta connessione di contenuti con esercitazioni pratiche mirate e di approfondimento

Contenuti:

1. Studio dei meccanismi di reazione. Metodi per lo studio dei meccanismi di reazione. Richiami di termodinamica e cinetica. Relazione tra cinetica e meccanismo. 2. Intermedi reattivi, effetti strutturali e solvente, correlazioni di energia libera 3. Catalisi e Cinetica dei processi catalizzati e non. Catalisi elettrofila, Catalisi metallica, organo-catalisi e relazione con processi enzimatici 4. Esame di classi di reazioni organiche

Modalità di esame:

esame scritto e approfondimento orale

Criteri di valutazione:

La valutazione della preparazione e del grado di comprensione degli argomenti svolti da parte degli studenti si baserà anche sulla capacità di applicare concetti e metodologie in modo autonomo a problemi complessi

Testi di riferimento:

Anslyn, Eric V.; Dougherty, Dennis A., Modern physical organic chemistry Eric V. Anslyn, Dennis A. Dougherty. Sausalito: University Science Books, 0
Smith, Michael B., March's advanced organic chemistry reactions, mechanisms, and structure Michael B. Smith. Hoboken: Wiley, 2012 Carey, Francis A.; Sundberg, Richard J., > Structure and mechanisms Francis A. Carey and Richard J. Sundberg. New York etc.: Kluwer, Plenum, 0

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

lucidi di lezione e appunti personali

CHIMICA ORGANICA SUPERIORE

Titolare: Prof.ssa GIULIA MARINA LICINI

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Conoscenze e abilità da acquisire:

Il corso si propone di fornire allo studente tutti i mezzi necessari per affrontare e risolvere problemi legati alla reattività e (stereo)selezione di processi catalitici (catalizzatori metallici, organocatalisi e biocatalisi) per la formazione di legami C-H, C-C e C-eteroatomo.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

Il corso si compone di lezioni frontali, seminari di docenti attivi nel campo e visite ad aziende del territorio. Tutte queste attività sono volte all'acquisizione di concetti fondamentali che riguardano la catalisi (stereo)selettiva e all'applicazione di tali concetti in ricerca di base e applicata e nella produzione industriale.

Contenuti:

Il corso è diviso in due parti: nella prima parte si studiano gli aspetti teorici della stereochimica (simmetria, chiralità, stereogenicità, stereoisomeria), i principi della sintesi stereoselettiva, ed i metodi per valutare il risultato stereochimico di una reazione stereoselettiva. Nella seconda parte vengono esaminate le versioni (stereo)selettive di una serie di reazioni organiche fondamentali e in particolare la catalisi (stereo)selettiva (catalizzatori metallici, bio ed organo catalizzatori) che porta alla formazione di legami C-H, C-C e C-eteroatomo. Per ciascuna classe, vengono esaminati possibili modelli che razionalizzano il decorso e la stereo selezione della reazione.

Modalità di esame:

L'esame consisterà nella presentazione e discussione orale di un lavoro di letteratura attinente alle tematiche del corso (fornito dai docenti) . Potrà essere prevista una prova scritta per accertare l'acquisizione dei concetti di base forniti durante il corso

Criteri di valutazione:

La valutazione si baserà sulla comprensione degli argomenti svolti e sull'acquisizione dei concetti e tecnologie trattate durante il corso. Sarà verificata anche la capacità di applicare tali concetti e tecnologie per la comprensione e esposizione di un lavoro di letteratura attinente ai contenuti del corso.

Testi di riferimento:

Patrick J. Walsh, Marisa C. Kozlowski, Fundamentals of Asymmetric Synthesis. Sausalito, California, USA: University Science Books, 2009 Eliel and Wilen, Stereochemistry of Organic Compounds. : Wiley, 1994 Kurt Mislow, Introduction to stereochemistry. Mineola, NY USA: Dover Publication Inc, 2002 Erick M. Carreira; Lisbet Kvaerno, Classic in Stereoselective Synthesis. Weinheim, DE: WileyVCH, 2009

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Dispense sul sito e-learning del Dipartimento (Moodle DISC) Articoli e reviews di letteratura

CHIMICA SUPRAMOLECOLARE

Titolare: Prof. FABRIZIO MANCIN

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:

Il corso non richiede prerequisiti particolari se non conoscenze di base di termodinamica, chimica inorganica e chimica organica acquisite nei corsi caratterizzanti precedenti.

Conoscenze e abilità da acquisire:

Al termine del corso lo studente sarà in grado di comprendere i principi base dell'interazione non covalente tra molecole ed il loro utilizzo per la costruzione di sistemi complessi. Saprà quindi comprendere i principi base della progettazione e realizzazione di un recettore e possiederà gli strumenti necessari ad intraprenderne lo studio. Lo studente inoltre conoscerà le principali applicazioni e potenzialità dei sistemi supramolecolari nel campo del trasporto, del sensing, della catalisi e nella costruzione di materiali supramolecolari e macchine molecolari.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

Il corso è organizzato in 64 ore di lezioni teoriche effettuate con il supporto di diapositive. Viene sollecitata la massima partecipazione degli studenti con inviti al dibattito e momenti di discussione.

Contenuti:

Chimica organica biomimetica e supramolecolare: Complessi "host-guest". Eteri corona. Riconoscimenti molecolare e chirale, catalisi e trasporto. Ionofori naturali (peptidi, eteri, esteri) e sintetici. Cavitandi e calixareni. Membrane e micelle. Polimeri sintetici come modelli enzimatici. Ciclodestrine. Modelli enzimatici su base steroidea. Rotaxani e catenani. Capsule molecolari. Sistemi auto-replicanti. Recettori per anioni. Nanotubi peptidici. Dendrimeri.

Modalità di esame:

L'esame è orale e diviso in due parti. La prima prevede la preparazione di un piccolo report, in forma di presentazione orale, a partire da un articolo pubblicato di recente nel settore della chimica supramolecolare. La seconda una discussione della presentazione e una serie di domande volte ad approfondire la conoscenza dei principi base della chimica supramolecolare. La presentazione del report alla commissione e la successiva discussione consentiranno l'accertamento del profitto di apprendimento.

Criteri di valutazione:

Lo scopo della valutazione è verificare l'acquisizione da parte dello studente delle conoscenze ed abilità descritte in precedenza. Verrà valutato il rigore scientifico della presentazione, la capacità di sintesi, la correttezza formale, l'acquisizione dei contenuti proposti nel corso e la capacità utilizzarli per elaborare una discussione organica su un argomento di ricerca.

Testi di riferimento:

J.W. Steed, D. R. Tuner, K. J. Wallace, Core concepts in Supramolecular Chemistry and Nanochemistry. : Wiley, 2007 J.W. Steed, J.L. Atwood, Supramolecular Chemistry. : Wiley, 2009

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Il materiale didattico è costituito principalmente dalle copie delle diapositive messe a disposizione dai docenti, dagli appunti di lezione e da articoli scientifici a carattere di review segnalati dai docenti. Lo studente può inoltre trovare appoggio e spunti di approfondimento in alcuni dei tesi in suo possesso sulla chimica fisica organica o nei numerosi trattati di chimica supramolecolare disponibili in commercio.

CHIMICA VERDE E SOSTENIBILE

Titolare: Prof. TOMMASO CAROFIGLIO

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:

Conoscenze di chimica organica, sintesi e catalisi nei loro aspetti teorici ed applicativi.

Conoscenze e abilità da acquisire:

L'obiettivo è di fornire gli strumenti culturali necessari a valutare l'impatto ambientale della produzione chimica e di individuare quali sono le aree di ricerca di maggiore interesse che debbono essere sviluppate per realizzazione uno sviluppo sostenibile. Il corso dovrebbe mostrare allo studente l'importanza della progettazione dei processi chimici nello sviluppo di una chimica moderna. Lo studente sarà indirizzato all'applicazione delle metodologie di progettazione sostenibile in diversi settori quali quello energetico, della valorizzazione delle biomasse e della produzione pulita di molecole di larga produzione industriale. Il corso dovrebbe permettere allo studente di acquisire le seguenti conoscenze di base: - definizione di biomassa e di sicurezza di un processo chimico. - importanza della minimizzazione dei rifiuti e di una progettazione adeguata alla sostenibilità. - metriche che permettono di misurare l'efficienza chimica ed ambientale di un processo chimico. - metodi per la selezione di un solvente sicuro e sostenibile. - principi della classificazione delle reazioni in funzione della economia atomica. - metodologie e le scelte che hanno portato alla ottimizzazione dell'impatto ambientale della produzione di molecole di larga produzione. Le principali abilità (cioè la capacità di applicare le conoscenze acquisite) saranno: -Essere in grado di comprendere il potenziale campo di applicazione dei principi della "green Chemistry". -Essere in grado di condurre valutare i diversi fattori che portano alla valutazione di un processo ambientale. -Essere in grado di applicare le metriche per misurare l'impatto ambientale di un processo chimico -Essere in grado di progettare una sintesi organica secondo i dettami della chimica verde e sostenibile

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

Il corso si compone di lezioni frontali, seminari di docenti attivi nel campo e visite ad aziende del territorio. Tutte queste attività sono volte all'acquisizione di concetti fondamentali che riguardano la chimica verde e sostenibile e la sua applicazione in ricerca di base e applicata e nella produzione industriale.

Contenuti:

I principi della Chimica Verde. Misura dell'efficienza di un processo chimico. Riduzione dei materiali di scarto. Il concetto di efficienza atomica. Materiali di partenza sicuri per realizzare processi chimici verdi. Risorse rinnovabili e trasformazione delle biomasse per la produzione di chemicals e energia (bioraffinerie) (per esempio valorizzazione della lignina e scarti agroalimentari, produzione del biodiesel e bioetanolo). Mezzi di reazione sicuri per processi chimici. Alternative al solvente organico. Liquidi supercritici. Liquidi Ionici. L'acqua come solvente di reazione. Uso di miscele eutettiche. Reazioni in assenza di solvente. Processi catalitici. Tecnologie innovative: processi in flusso continuo. Benefici dell'intensificazione di processo e delle tecnologie di flusso. Convertire la chimica in "batch" in quella in flusso continuo, "green metrics" applicate alla chimica in flusso. Esempi reali dell'applicazione dei principi della chimica verde nell'ambito della ricerca accademica e dei processi industriali (con interventi di speakers esterni industriali e accademici)

Modalità di esame:

Esame scritto (con domande aperte sui contenuti di base del corso) con integrazione orale (presentazione e discussione di un lavoro di letteratura recente sulle tematiche affrontate nel corso scelto all'interno di una serie lavori proposti dai docenti).

Criteri di valutazione:

La valutazione si baserà sulla comprensione degli argomenti svolti e sull'acquisizione dei concetti e tecnologie trattate durante il corso. Sarà verificata anche la capacità di applicare tali concetti e tecnologie per la comprensione e esposizione di un lavoro di letteratura attinente ai contenuti del corso.

Testi di riferimento:

Pietro Tundo, Alvise Perosa, Fulvio Zecchini, Methods and reagents for green chemistry. : Wiley, 2007

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Materiale didattico sul sito e-learning del Dipartimento (Moodle DISC) Articoli e reviews di letteratura

CONTROLLO E QUALITÀ IN CHIMICA ANALITICA

Titolare: Dott. DENIS BADOCCO

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:

Lo studente che accede a questo insegnamento deve essere in possesso di una buona preparazione nei fondamenti della chimica analitica, dai concetti teorici di base alle tecniche analitiche strumentali di base. Lo studente deve inoltre conoscere i concetti di base di statistica classica (univariata) per la chimica analitica forniti nei corsi di Chimica Analitica I e II.

Conoscenze e abilità da acquisire:

Le lezioni frontali sono dedicate all'acquisizione dei concetti di base della statistica classica univariata ed all'acquisizione di strumenti informatici specifici basati sull'uso di Excel per la soluzione di alcuni problemi base di statistica classica. Lo studente deve essere in grado di conoscere i fondamenti teorici che stanno alla base delle espressioni usate dalle normative per il controllo e la validazione di un metodo analitico. Lo studente infine deve saper applicare le abilità acquisite a problemi chimico-analitici reali sia applicativi che di ricerca. Scopo del corso è infine quello di formare le abilità per gestire il Controllo di Qualità all'interno di un Azienda in modo da ottenere dati e informazioni attendibili, intervenire tempestivamente per prevenire la produzione di prodotti o servizi non conformi.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

Le lezioni di aula verranno tenute con il Videoproiettore in PowerPoint. Per la soluzione di esercizi verrà utilizzata la lavagna classica. Per le lezioni ed esercitazioni il Docente utilizzerà Microsoft Excel. Per svolgere gli esercizi individuali e i calcoli per la relazione finale gli studenti possono utilizzare i PC dell'aula informatica.

Contenuti:

Il corso affronta le basi teoriche, gli aspetti normativi e case studi pratici del controllo qualità in chimica analitica, introducendo anche all'uso di software applicativi (Matlab e R). Il corso offre basi statistiche e software applicabili in qualsiasi campo ed altresì una formazione specifica utile in particolare a futuri responsabili di laboratorio o certificatori. Il corso sarà strutturato nei seguenti macro argomenti: 1. ELEMENTI DI STATISTICA UNIVARIATA 2. CONTROLLO E QUALITÀ del DATO SPERIMENTALE e ASPETTI NORMATIVI 3. TECNICHE CHEMIOMETRICHE Sinossi dettagliata: 1. ELEMENTI DI STATISTICA UNIVARIATA Tipi di errore. Elementi di Statistica Classica. Le distribuzioni normale, t-student, F-Fischer. La distribuzione campionaria della media e Teorema del limite centrale. Inferenza Statistica (Test Parametrici). Statistica non parametrica (Test Non Parametrici). ANOVA. La calibrazione. Elaborazione dei dati. Presentazione dei risultati. Interpretazione dei risultati. Elenco delle possibili fonti di incertezza. 2. CONTROLLO E QUALITÀ del DATO SPERIMENTALE e ASPETTI NORMATIVI Parametri di prestazione di un metodo sperimentale Valutazione dell'esattezza. Valutazione della precisione. Differenti approcci alla valutazione dell'incertezza. Limite di Rivelabilità. Limite di Quantificazione. Intervallo di Linearità. Controlli interni (Strumenti per la validazione). Controlli esterni. Audit interni per il mantenimento dell'Accreditamento nel tempo in conformità alla Norma UNI CEI EN ISO/IEC 17025:2005. Carte di controllo e norma UNI ISO 7870-2:2014. Accredimento e certificazione. Che cos'è la validazione del metodo? Definizioni. Perché è necessario validare i metodi? Quando devono essere validati o verificati i metodi? Chi esegue la validazione di un metodo? Come si valida un metodo? 3. TECNICHE DI STATISTICA MULTIVARIATA • Analisi delle componenti principali (PCR). Esempi • Analisi dei clusters. Matrice delle distanze, matrice di similarità. Metodi gerarchici agglomerativi per l'analisi dei clusters. Dendrogrammi. • Tecniche di Classificazione. Matrice di confusione. Matrice delle perdite. Parametri di valutazione della classificazione. Analisi discriminante (DA). Il metodo di classificazione SIMCA. Esempi • Metodo di Regressione in Componenti Principali (PCR). Metodo Partial Least Squares (PLS). Esempi pratici di calibrazione mediante regressione PLS: spettrofotometria, voltammetria pulsata di ridissoluzione, cromatografia-spettrometria di massa. • Il Disegno sperimentale. Disegno Sperimentale. Il piano fattoriale di Youden. Valutazione della Robustezza del Metodo Sperimentale.

Modalità di esame:

Interrogazione orale

Criteri di valutazione:

Verrà valutata la conoscenza dei principi teorici spiegati a lezione e la capacità di risolvere problemi applicativi.

Testi di riferimento:

Giuseppe Cichitelli, Probabilità e Statistica. : Maggioli Editore,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Fondamentale sarà l'utilizzo di materiale distribuito dal docente reso disponibile in rete (<http://www.chimica.unipd.it/case>) e degli appunti di lezione. Alcuni documenti di riferimento/linee guida come: • EURACHEM. The fitness for purpose of analytical methods. A laboratory guide to method validation and related topics. First edition, 1998 (www.eurachem.ul.pt) • UNICHIM. Linee guida per la validazione di metodi analitici nei laboratori chimici. Criteri generali. Manuale N. 179/0, Milano, 1999. • Thompson M., Ellison S.L.R., Wood R. Harmonised guidelines for the single-laboratory validation of methods of analysis (IUPAC technical report). Pure Appl. Chem. 74(5): 835-855, 2002. www.iupac.org • Guida Eurachem/CITAC per la qualità in chimica analitica quale valore aggiunto ai fini dell'accreditamento "Guide to Quality in Analytical Chemistry. An Aid to Accreditation"

CRISTALLOGRAFIA E BIO-CRISTALLOGRAFIA

Titolare: Prof. ROBERTO BATTISTUTTA

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:

Nozioni di base di matematica, fisica e chimica biologica.

Conoscenze e abilità da acquisire:

Il corso descrive le moderne metodologie per la determinazione della struttura atomica tridimensionale delle piccole molecole, organiche ed inorganiche, e delle macromolecole biologiche mediante diffrazione di raggi X su cristallo singolo. Oltre ai concetti base della diffrazione e della risoluzione della struttura molecolare, particolare rilievo verrà dato ai più recenti ed avanzati sviluppi delle tecniche cristallografiche, applicate principalmente allo studio delle macromolecole biologiche. Verrà inoltre introdotta un'altra tecnica biofisica diventata fondamentale per la caratterizzazione strutturale delle macromolecole e di loro complessi, la microscopia crioelettronica (Cryo-EM). Il corso sarà arricchito con esempi di determinazione di strutture di particolare interesse e con la presentazione ed analisi di articoli recenti su aspetti avanzati della cristallografia.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

Lezioni frontali con dimostrazioni pratiche in aula condotte dal docente.

Contenuti:

Panoramica sulla cristallografia: i cristalli, la diffrazione di raggi-X e la matematica della cristallografia. Cristallizzazione: proprietà, crescita e qualità dei cristalli; tecniche e strategie di cristallizzazione; cristallizzazione di proteine. Geometria dei cristalli: reticoli periodici e simmetrie in 3D; gruppi punto e gruppi spaziali; il reticolo reciproco e le simmetrie nello spazio reciproco; assenze sistematiche. Le basi della diffrazione: diffusione e diffrazione di raggi-X; fattori di diffusione atomici; diffrazione di un cristallo; il fattore di struttura; il fattore "termico" B; principi geometrici della diffrazione, legge di Bragg, sfera di Ewald e coppie di Friedel; diffusione anomala. Strumentazione e tecniche di raccolta dei dati di diffrazione: panoramica, elaborazione dei dati ("data reduction"). Dai dati di diffrazione alla densità elettronica: introduzione; trasformata di Fourier e diffrazione; il problema della fase; funzione di Patterson e mappe di Patterson. Metodi per l'ottenimento delle fasi: come si risolve il problema della fase; metodi basati sulla sottostruttura di atomi marcatori; sostituzione isomorfa (MIR, SIR), diffusione anomala (SAD, MAD), SIRAS, metodi diretti, sostituzione molecolare; miglioramento delle fasi, tecniche di "density modification". "The resolution revolution": recenti cruciali progressi nella microscopia crioelettronica (Cryo-EM). Confronto tra cristallografia a raggi-x e Cryo-EM. Interazione degli elettroni con la materia: principi della diffusione e diffrazione degli elettroni; schema base di un microscopio elettronico a trasmissione (TEM). Formazione dell'immagine per contrasto di ampiezza o di fase: TEM di campioni biologici; approssimazione "weak-phase-object" per diffusori deboli di elettroni; uso della sfocatura e delle aberrazioni delle lenti per aumentare il contrasto. Trasformata di Fourier e formazione dell'immagine nel TEM: "point spread function" (PSF) e "contrast transfer function" (CTF); "single particle analysis"; preparazione dei campioni. Dalle immagini in 2D alla struttura in 3D: ricostruzione delle immagini; concetto di risoluzione in cristallografia e in microscopia crioelettronica. Costruzione e affinamento del modello in cristallografia e microscopia crioelettronica: principi e aspetti pratici. Validazione e analisi del modello: valutazione critica del modello molecolare ottenuto per cristallografia o microscopia crioelettronica. Guida alla lettura di un articolo di "cristallografia". Esempi di ottenimento della struttura 3D di proteine.

Modalità di esame:

Discussione orale su tematiche della disciplina.

Criteri di valutazione:

Lo studente verrà valutato in base al livello di apprendimento, alla consapevolezza, alla capacità di riflessione e alla capacità critica pertinenti alle competenze specifiche della disciplina.

Testi di riferimento:

Grant Jensen, Getting Started in Cryo-EM. : , Bernhard Rupp, Biomolecular crystallography. New York: Garland Science, 2010 Giacobuzzo, Monaco, Artioli, Viterbo, Ferraris, Gilli, Zanotti, Catti, Fundamentals of Crystallography, 2nd Edition. Oxford: Oxford University Press, 2002

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Dispense di lezione e video-lezioni AA 2019-20 messe a disposizione sul sito personale del docente.

ELETTROCHIMICA

Titolare: Prof. FLAVIO MARAN

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:

Conoscenze di base di Chimica Fisica.

Conoscenze e abilità da acquisire:

Comprensione delle proprietà di fasi ed interfasi rilevanti nei sistemi elettrochimici, analisi dettagliata della cinetica elettrodoica, studio dei principali metodi elettrochimici, e applicazione di tali conoscenze in casi specifici, come le microscopie elettrochimiche a scansione di sonda.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

Lezioni d'aula

Contenuti:

Proprietà generali dei sistemi elettrochimici. Proprietà delle soluzioni elettrolitiche. Interazioni ione-solvente e ione-ione. Conducibilità. Le superfici metalliche in elettrochimica. Interfase elettrodo-soluzione elettrolitica. Teorie del doppio strato elettrico. Cinetica elettrodoica. Sovratensione di trasferimento elettronico e relazione tra corrente e potenziale applicato. Sovratensione di trasporto di massa. Competizioni cinetiche. Metodi sperimentali più diffusi per lo studio delle cinetiche elettrodoiche in condizioni stazionarie o transienti, come la voltammetria all'elettrodo a disco rotante, la cronoamperometria, e la voltammetria ciclica. Effetto delle reazioni chimiche associate al trasferimento elettronico. Trasferimento elettronico dissociativo e analisi convolutiva. Chemiluminescenza elettrogenata. Ultramicroelettrodi. Microscopia elettrochimica a scansione. Electrochemical atomic-force and scanning-tunneling

microscopies.

Modalità di esame:

Test intermedi ed esame finale. Partecipazione attiva al corso con discussioni.

Criteri di valutazione:

Lo studente deve dimostrare una buona comprensione dei sistemi elettrochimici, sia in condizioni di equilibrio sia di non equilibrio, e la capacità di utilizzare tali concetti nello studio dei processi elettrochimici in diverse condizioni di trasporto di massa e controllo del potenziale elettrodo.

Testi di riferimento:

A. J. Bard, L. R. Faulkner, *Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications*. : Wiley, 2001

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Appunti di lezione. Presentazioni. "Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications", di A. J. Bard e L. R. Faulkner, 2a edizione, Wiley, 2001. Ulteriore materiale sarà fornito dal docente.

MAGNETIC SPECTROSCOPIES

Titolare: Prof. LORENZO FRANCO

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:

Nozioni di base di Fisica e Chimica quantistica.

Conoscenze e abilità da acquisire:

Il corso si propone di familiarizzare lo studente con i fondamenti teorici e sperimentali delle spettroscopie magnetiche (NMR, EPR). Si forniranno esempi di applicazioni dei vari tipi di spettroscopie per la risoluzione di problemi chimico-fisici riguardanti struttura e funzioni molecolari.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

Il corso è basato sulle lezioni d'aula che includeranno esercizi su problemi proposti dal docente anche tratti dalla letteratura scientifica.

Contenuti:

Introduzione alle spettroscopie magnetiche. Caratteristiche della radiazione elettromagnetica. Fenomeni di interazione tra radiazione e materia. Descrizione classica e formalismo quantomeccanico dei momenti magnetici. Proprietà dello spin di elettroni e nuclei. Hamiltoniano di spin. Equazioni di Bloch e rilassamenti di spin. Matrice densità e formalismo degli operatori prodotto. Tecniche impulsive di risonanza magnetica (FID, eco di spin, sequenze complesse). Interazione Zeeman. Interazioni magnetiche di elettroni e nuclei. Trasformata di Fourier e risonanza magnetica. Introduzione agli esperimenti NMR multidimensionali. Risonanza di spin elettronico. Interazioni isotrope ed anisotrope: interazione iperfine, fattore g. Spettri EPR in fase liquida, solida cristallina e disordinata. Zero Field Splitting. Tecniche avanzate di spettroscopia EPR: ENDOR, EPR ad alto campo-alta frequenza, EPR impulsato.

Modalità di esame:

Esame orale, della durata di circa un'ora, con domande di teoria e semplici esercizi numerici sul programma svolto.

Criteri di valutazione:

Al termine del corso lo studente deve dimostrare una buona padronanza dei concetti fondamentali delle risonanze magnetiche e la capacità di applicarli a situazioni sperimentali.

Testi di riferimento:

H. Günther, *NMR Spectroscopy: Basic Principles, Concepts, and Applications in Chemistry*. : J. Wiley & Sons, 1995 J. A. Weil, J. R. Bolton., *Electron Paramagnetic Resonance: Elementary Theory and Practical Applications*. : J. Wiley & Sons, 2007 J. Keeler, *Understanding NMR spectroscopy*. : J. Wiley & Sons, 2010

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Dispense di lezione. Durante le lezioni verrà fornita una lista di testi consigliati aggiuntivi.

MAGNETOCHIMICA

Titolare: Prof. MARCO RUZZI

Periodo: Il anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Conoscenze e abilità da acquisire:

Il corso si propone di fornire le basi per la comprensione (a) delle proprietà collettive di materiali magnetici a partire dalle proprietà magnetiche di atomi, radicali e cluster magnetici (Magnetochemistry) e (b) degli effetti delle proprietà magnetiche e di spin sulle reazioni chimiche foto indotte (Spin Chemistry). Saranno introdotti i relativi metodi sperimentali, e le prospettive di applicazioni nel settore dei dispositivi di memoria e della produzione energetica.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

Lezioni frontali.

Contenuti:

Introduzione alla fenomenologia e ai principi relativi al magnetismo. Paramagnetismo e diamagnetismo. Magnetismo d'ordine e di cooperazione: ferromagnetismo, antiferromagnetismo, ferrimagnetismo. Origine del paramagnetismo e del diamagnetismo. L'equazione di Brillouin e la legge di Curie. Teoria perturbativa di Van Vleck. Proprietà magnetiche dei metalli: paramagnetismo di Pauli e diamagnetismo di Landau. Tecniche sperimentali per la

misura della suscettività magnetica. La magnetometria SQUID. Tecniche NMR. Introduzione ai momenti angolari e al magnetismo nelle molecole. Accoppiamento di momenti angolari. Hamiltoniani e funzioni d'onda nello spazio degli spin. Interazioni dipolari spin-spin e teoria dello Zero-Field splitting. Interazione di scambio: modelli di Heisenberg e di Ising. Ioni paramagnetici dei metalli di transizione. Ioni liberi e ioni legati. Campo dei leganti. Hamiltoniano di spin degli ioni di transizione legati. Origine del ferromagnetismo in materiali inorganici. Ferromagnetismo e antiferromagnetismo in cristalli molecolari. Specie paramagnetiche stazionarie e transienti in materiali molecolari organici. Polarizzazione di spin in stati fotoeccitati. Teoria delle coppie radicaliche spin-correlate. Influenza di processi spin-selettivi sull'efficienza fotovoltaica di film polimerici per celle solari organiche. Nanomagneti molecolari: magnetismo in sistemi di molecola singola (SMM) e cluster di ioni. Alcune applicazioni in ambito spintronico.

Modalità di esame:

Prova orale di circa 40 minuti costituita da due domande aperte di carattere generale volte a valutare la comprensione dei concetti più importanti inerenti due diversi argomenti trattati nel corso. Al contempo una serie di domande di carattere specifico permetteranno di valutare nel dettaglio il livello di approfondimento della cultura acquisita e la capacità del candidato di rielaborare in modo critico quanto appreso.

Testi di riferimento:

Carlin, Richard L., Magnetochemistry. Berlin: Springer-Verlag, 1986 Orchard, A.F., Magnetochemistry. Oxford: Oxford University Press, 2003

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Saranno fornite slides di lezione e dispense sull'intero contenuto del corso.

MECCANISMI DI REAZIONE IN CHIMICA INORGANICA

Titolare: Prof.ssa CRISTINA TUBARO

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:

Conoscenze di chimica inorganica, relative principalmente alle proprietà dei metalli di transizione.

Conoscenze e abilità da acquisire:

Il corso ha lo scopo di fornire allo studente le nozioni essenziali per la comprensione dei meccanismi con cui procedono i più importanti tipi di reazioni in chimica inorganica, con particolare attenzione alle reazioni di sostituzione, di inserzione, di addizione ossidativa e di eliminazione riduttiva. Un altro aspetto molto importante del corso è relativo all'effetto della natura del centro metallico sulla reattività dei leganti coordinati e all'uso di composti inorganici o metallorganici in reazioni metallo-catalizzate.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

I contenuti del corso saranno illustrati con diapositive.

Contenuti:

Cenni di cinetica chimica e delle tecniche sperimentali per seguire il decorso di reazione. Classificazione delle reazioni e dei meccanismi di reazione in chimica inorganica. Reazioni di sostituzione nucleofila ed elettrofila in chimica inorganica: meccanismi A, I_a, I_d, D. Scale di nucleofilicità. Relazioni fra geometria, configurazione elettronica e meccanismo. Sostituzioni nucleofile su composti tetracoordinati a struttura tetraedrica. Sostituzioni nucleofile su composti tetracoordinati a geometria quadrato planare. Effetto dei leganti coordinati, effetto trans. Sostituzioni nucleofile su complessi ottaedrici. Reazioni di inserzione, natura e meccanismi della reazione. Inserzione di CO e di alcheni. Reazioni ossidoriduttive e trasferimenti elettronici. Meccanismi di trasferimento elettronico a sfera esterna: cenni sulla teoria di Marcus. Meccanismi di trasferimento elettronico a sfera interna. Reazioni di addizione ossidativa e di eliminazione riduttiva: natura e meccanismo delle reazioni. Cenni alle reazioni di isomerizzazione con complessi di metalli di transizione. Modifiche della reattività dei leganti per effetto della complessazione: il centro metallico come punto di raccolta dei reagenti e come distributore di densità elettronica nei leganti. Catalizzatori e reazioni catalizzate. Cicli catalitici. Ossidazione controllata degli alcheni. Idrogenazione degli alcheni. Idroformilazione degli alcheni. Reazioni di carbonilazione. Reazioni di polimerizzazione. Metatesi di alcheni. Reazione di Heck.

Modalità di esame:

Esame orale della durata di circa 40 minuti in cui viene chiesto allo studente di descrivere e spiegare due argomenti svolti durante il corso.

Criteri di valutazione:

L'esame orale sarà valutato secondo i seguenti criteri: -aderenza delle risposte alle domande proposte; -livello di comprensione e dettaglio; -proprietà e sicurezza di linguaggio.

Testi di riferimento:

Crabtree, Robert H., > organometallic chemistry of the transition metals Robert H. Crabtree. 5. ed. -Hoboken: Wiley, 0

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Diapositive di lezione fornite agli studenti. Testo per consultazione: R. G. Wilkins, Kinetics and Mechanisms of Reaction of Transition Metal Complexes.

MECCANISMI DI REAZIONE IN CHIMICA ORGANICA

Titolare: Prof. CRISTIANO ZONTA

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:

Chimica Organica I,II,III. IV. Nozioni di base di Termodinamica.

Conoscenze e abilità da acquisire:

Il corso si propone di completare il percorso di insegnamento delle Chimica Organica fornendo gli strumenti teorici e sperimentali per studiare nel dettaglio

un meccanismo di reazione. In particolare, oltre a allo studente una visione panoramica delle tecniche analitiche e sperimentali per lo studio di un meccanismo di reazione, una parte del corso sarà rivolta all'utilizzo della chimica computazionale in chimica organica. Quest'ultima parte permetterà allo studente di acquisire alcune delle conoscenze e delle competenze necessarie per l'analisi dettagliata di un meccanismo di reazione. La parte finale del corso sarà dedicata all'utilizzo della luce in Chimica Organica. Dopo alcuni cenni di fotofisica, il corso si dedicherà alla fotochimica e alle reazioni fotoredox. Queste competenze vanno a completare la panoramica delle reattività in Chimica Organica.

Contenuti:

1. Richiamo principi meccanismi di reazione. Richiami di termodinamica e cinetica. Relazione tra cinetica e meccanismo. Superfici di energia potenziale e coordinata di reazione. Classificazione generale meccanismi di reazione. 2. Metodi sperimentali e tecniche analitiche per lo studio dei meccanismi di reazione. Identificazione Prodotti. Determinazione presenza intermedi (Isolamento/Intrappolamento). Evidenze cinetiche. Evidenze stereochimiche. Tecniche analitiche. 3. Effetto isotopico cinetico e di equilibrio: primario e secondario, esempi e teoria. Effetto Tunnel. 4. Utilizzo dell'effetto dei sostituenti per identificare un meccanismo. Approfondimento sulle correlazioni di Energia Libera. Scale di nucleofilicità. 5. Fotofisica e fotochimica. Utilizzo in chimica organica della luce e reazioni Fotoredox. 5. Esercitazioni di chimica computazionale. Metodi teorici per lo studio dei meccanismi di reazione. Introduzione ai metodi computazionali. Calcolo proprietà fisiche (IR, NMR, UV, CD). Studio di stati di transizione.

Modalità di esame:

Orale con presentazione e discussione di un lavoro di letteratura e domande aperte sul corso. Durata 30 minuti.

Testi di riferimento:

Eric Anslyn and Dennis Dougherty, Modern Physical Organic Chemistry. : Univ Science Books, Reinhard Bruckner, Organic Mechanism. : Springer, Michael B. Smith, March's, Advanced Organic Chemistry. : Wiley,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Dispense fornite durante il corso

OPTICAL PROPERTIES OF MOLECULAR SYSTEMS

Titolare: Prof.ssa ELISABETTA COLLINI

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:

Conoscenza di argomenti insegnati nei corsi di chimica fisica di base.

Conoscenze e abilità da acquisire:

Il corso si propone di illustrare le interazioni delle radiazioni elettromagnetiche con i sistemi molecolari, al fine di caratterizzarne la struttura, le proprietà energetiche e la dinamica di risposta a tali stimoli, includendo anche le proprietà fotofisiche e i processi non radiativi (trasferimenti di energia e rilassamenti).

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

L'attività principale si svolge in forma di lezioni d'aula. Viene sollecitata la partecipazione attiva degli studenti riservando tempo a domande e risposte. Il corso si terrà in inglese o in italiano a seconda della presenza di studenti che provengono da scambi internazionali o di specifiche richieste degli studenti che seguono il corso.

Contenuti:

1. Campi elettromagnetici (eq di Maxwell) 2. Proprietà dielettriche di materiali e molecole (regime lineare e non lineare) 3. teoria delle perturbazioni dipendente dal tempo per la spettroscopia nel dominio delle frequenze e dei tempi 4. interazione con il bagno: funzioni di correlazione temporale 5. Assorbimento, emissione e scattering: reinterpretazione di osservabili spettroscopici noti in termini di funzioni di correlazione (lineshape function) 6. Transizioni elettroniche e vibroelettroniche: spettroscopia di assorbimento ed emissione di luminescenza. 7. Fotofisica e fotochimica degli stati aggregati, a) Eccitoni di Frenkel. b) Processi non radiativi: Processi di trasferimento di energia 8. Spettroscopia risolta nel dominio dei tempi per lo studio della dinamica e della fotofisica di sistemi molecolari. Teoria dei responsi applicata alle spettroscopie ottiche lineari e non lineari. 9. Cenni di spettroscopia ottica non lineare nel dominio dei tempi e delle frequenze.

Modalità di esame:

Esame orale finale con la possibilità di scegliere tra due modalità: 1. esame orale 'classico' in cui il docente porrà domande sui contenuti del corso per verificare la preparazione dello studente 2. esame tipo 'journal club' in cui lo studente esporrà i risultati di un suo personale approfondimento di una tematica affrontata nel corso.

Criteri di valutazione:

Lo studente dovrebbe dimostrare una comprensione dei principi generali e una capacità di utilizzarli per la descrizione di specifiche tecniche delle spettroscopie ottiche. Dovrebbe anche saper cogliere e comprendere le relazioni che intercorrono tra dati spettroscopici e proprietà microscopiche e dinamiche dei sistemi molecolari.

Testi di riferimento:

Jeanne L. McHale, Molecular spectroscopy. : Prentice-Hall, Inc., William W. Parson, Modern Optical Spectroscopy. : Springer-Verlag,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Le raccolte di diapositive e dei materiali utilizzati durante le lezioni saranno disponibili per il download sulla piattaforma Moodle. I testi sono redatti in inglese.

PHYSICAL CHEMISTRY OF THE SOLID STATE AND OF MATERIALS

Titolare: Prof.ssa CAMILLA FERRANTE

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 40A+10E; 6,00

Prerequisiti:

Lo studente deve possedere concetti e nozioni di base della Fisica (meccanica, dinamica ed elettromagnetismo). È necessaria la conoscenza alcuni elementi di meccanica quantistica (operatori, autofunzioni e autovalori, le soluzioni dei più comuni problemi elementari, metodi approssimati). Sono inoltre date per acquisiti i concetti di legame chimico, di forze intermolecolari e alcune nozioni di spettroscopia a livello dei corsi di laurea triennale e del corso parallelo (I anno, I semestre della laurea magistrale) di Chimica Fisica IV.

Conoscenze e abilità da acquisire:

Il corso mira a far acquisire agli studenti i concetti e le nozioni di base relativi a sistemi solidi, cristallini e non cristallini, ed alle proprietà dei materiali. Mira, altresì, a introdurre concetti e nozioni necessari a comprendere sviluppi e tendenze nei materiali e nanostrutture funzionali.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

L'attività principale si svolge in forma di lezioni d'aula. Viene sollecitata la partecipazione attiva degli studenti riservando tempo a domande e risposte e deviando, di tanto in tanto, dal percorso programmato per introdurre riferimenti a temi attuali e ad attività di ricerca applicativa. Il corso si terrà in inglese o in italiano a seconda della presenza di studenti che provengono da scambi internazionali o di specifiche richieste degli studenti che seguono il corso.

Contenuti:

1. Nozioni di base. Classificazione dei solidi 2. Struttura e simmetria nei cristalli 3. Ordine locale nei fluidi e nei solidi amorfi 4. Polimeri 5. Dinamica reticolare 6. Fononi e proprietà termiche 7. Elettroni nei cristalli 8. Metalli e semiconduttori 9. Proprietà fisiche dei cristalli. Principi generali 10. Proprietà dielettriche e ottiche degli isolanti 11. Materiali magnetici 12. Dispositivi a base di semiconduttori inorganici e organici

Modalità di esame:

Esame orale in cui si chiede allo studente di descrivere e spiegare uno o più argomenti svolti nello corso con lo scopo di accertare le conoscenze acquisite dallo studente e la capacità di rielaborarle personalmente.

Criteri di valutazione:

Lo studente dovrebbe dimostrare una comprensione dei principi generali e una capacità di utilizzarli per la descrizione di specifiche categorie di solidi e particolari fenomeni. Dovrebbe anche saper cogliere e comprendere le relazioni che intercorrono tra strutture e proprietà

Testi di riferimento:

Kittel, Charles, Introduction to solid state physics Charles Kittel. New York: London, Sydney, J. Wiley & sons, 0 Strobl, Gert, Condensed matter physics crystals, liquids, liquid crystals, and polymers Gert Strobl translation of the original German version by Steven P. Brown. Berlin etc.: Springer, 0 Ziman, John M., Principles of the theory of solids by J. M. Ziman. Cambridge etc.: Cambridge university press, 1972

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Copie delle diapositive utilizzate nel corso delle lezioni e materiale utile per lo studio saranno scaricabili dalla piattaforma Moodle del dipartimento.

PHYSICAL METHODS IN ORGANIC CHEMISTRY

Titolare: Prof.ssa ESTER MAROTTA

Mutuato da: Laurea magistrale in Chimica Industriale (Ord. 2015)

Periodo: Il anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:

Buone conoscenze di chimica organica e concetti base di spettroscopia NMR e spettrometria di massa.

Conoscenze e abilità da acquisire:

Procedure avanzate di NMR e spettrometria di massa e loro applicazioni.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

Lezioni frontali

Contenuti:

- Risonanza Magnetica Nucleare: Proprietà magnetiche dei nuclei. Principi operativi e strumentazione. Tecnica ad impulsi con trasformata di Fourier. Parametri di acquisizione. Rilassamento. Equivalenza chimica ed equivalenza magnetica. Spettri del primo ordine e di ordine superiore. Diastereotopismo. Spettroscopia ¹³C-NMR. Effetto Nucleare Overhauser. Tecniche di spettroscopia NMR di correlazione omo e eteronucleare con riferimento alle sequenze di impulsi. - Spettrometria di massa: Sommario dei principi di base. Ionizzazione chimica, ionizzazione a pressione atmosferica (ESI, APCI, APPI), ionizzazione con fasci laser (MALDI e AP-MALDI), spettrometria di massa ambiente (DESI-MS and DART-MS). Sommario degli analizzatori con esempi di applicazioni. Spettrometria di massa tandem (CID, UVPD, IRMPD, ECD, ETD). Applicazione delle tecniche di spettrometria di massa in proteomica, in metabolomica, nell'analisi di oligonucleotidi, oligosaccaridi e complessi non covalenti. Accoppiamento di tecniche di mobilità ionica con spettrometria di massa.

Modalità di esame:

Esame scritto

Criteri di valutazione:

La valutazione è basata sulla comprensione degli argomenti proposti, sull'abilità di applicarli all'identificazione di sostanze incognite e sull'abilità di selezionare la tecnica più adatta per la caratterizzazione di molecole e macromolecole organiche.

Testi di riferimento:

R. M. Silverstein, F. X. Webster, D. J. Kiemle, D. L. Bryce, Identificazione Spettroscopica di Composti Organici. ; E. de Hoffmann and V. Stroobant, Mass Spectrometry. Principles and Applications. ; John Wiley and Sons., H. Günther, NMR Spectroscopy. ; T. D. W. Claridge, High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry. ; Elsevier,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Dispense ed appunti di lezione.

PRINCIPLES AND APPLICATIONS OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY

Titolare: Prof. ANDREA BIFFIS

Periodo: Il anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:

Cultura chimica di base impartita nella Laurea triennale in Chimica o in Chimica Industriale.

Conoscenze e abilità da acquisire:

Costituisce obiettivo del corso l'acquisizione di una conoscenza della chimica metallorganica nei suoi aspetti fondamentali ed applicativi, con particolare riferimento all'utilizzo di composti metallorganici nella sintesi organica e nella catalisi.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

Lezioni frontali con ausilio di diapositive, fornite agli studenti. Il corso viene ufficialmente erogato in lingua inglese, ma potrà essere tenuto in italiano se tutti gli studenti iscritti avranno adeguate conoscenze di italiano e manifesteranno questa preferenza.

Contenuti:

Introduzione I composti metallorganici: definizione. Aspetti storici. Proprietà generali e metodologie di preparazione. I composti metallorganici nella tavola periodica: tendenze. Composti organometallici degli elementi dei gruppi principali Verranno illustrate le metodologie preparative, le proprietà e le applicazioni dei più importanti composti metallorganici dei metalli dei diversi gruppi principali: composti metallorganici nucleofili, composti elementari organici dei gruppi 13 e 14. Composti organometallici dei metalli di transizione Verranno illustrate le metodologie preparative, le proprietà e le applicazioni delle principali classi di composti organometallici di transizione quali composti contenenti legami sigma metallo-carbonio, metallo-carbonili, metallo-carbeni, metalloolefine e metalloalchini, composti allilici, polienilici e polienici. Particolare risalto verrà dato alle applicazioni in sintesi e catalisi metallorganica

Modalità di esame:

esame orale

Criteri di valutazione:

La valutazione della preparazione dello studente verrà effettuata verificando il grado di comprensione degli argomenti svolti, l'acquisizione dei concetti fondamentali illustrati e la capacità di applicarli in modo autonomo e consapevole.

Testi di riferimento:

C. Elschenbroich, Organometallics. Weinheim: VCH, 2006

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Appunti di lezione Presentazioni PowerPoint di lezione Presentazioni Powerpoint con commento audio Testo di riferimento (vedi sotto) Testi di consultazione (disponibili presso il docente ovvero presso la Biblioteca del Dipartimento di Scienze Chimiche): J. Hartwig, "Organotransition metal chemistry", University Science Books, Sausalito, 2010. R. H. Crabtree, "The Organometallic Chemistry of the Transition Metals", 5th ed., Wiley, New York 2009. "Comprehensive Organometallic Chemistry 3", M. P. Mingos, R. H. Crabtree (eds.), Elsevier, Amsterdam 2007. "Transition Metals for Organic Synthesis", M. Beller, C. Bolm (eds.), 2nd ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2004. "Applied Homogeneous Catalysis with Organometallic Compounds", B. Cornils, W. A. Herrmann (eds.), 2nd ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2002. L. S. Hegedus, "Transition Metals in the Synthesis of Complex Organic Molecules", 2nd ed., University Science Books, Sausalito 1999.

PROTEIN STRUCTURE AND DYNAMICS

Titolare: Prof. MASSIMO BELLANDA

Periodo: Il anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:

Conoscenze di base di chimica fisica e biochimica.

Conoscenze e abilità da acquisire:

Questo insegnamento si prefigge di fornire le basi per permettere la comprensione e l'interpretazione dei più comuni esperimenti NMR multidimensionali utilizzati in generale per la caratterizzazione di molecole complesse in soluzione. Verranno descritti gli esperimenti fondamentali per la raccolta dei dati necessari alla determinazione della struttura in soluzione di peptidi e proteine. Saranno anche trattati i metodi di analisi utili per l'interpretazione dei dati sperimentali. Infine, sarà descritto l'utilizzo di parametri NMR per l'ottenimento di informazioni sui moti delle proteine nelle diverse scale dei tempi e di esperimenti per lo studio di interazioni.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

Lezioni frontali con brevi esercitazioni e/o lavori di gruppo. Il corso si terrà in inglese o in italiano a seconda della presenza di studenti che provengono da scambi internazionali o di specifiche richieste degli studenti che seguono il corso

Contenuti:

1. Richiami ai principi di base dell'NMR. 2. Rilassamenti, accoppiamento dipolare, effetto nucleare Overhauser. 3. Aspetti pratici: strumentazione, acquisizione e trattamento del FID, caratteristiche del campione, soppressione del solvente. 4. Il formalismo degli operatori prodotto. Introduzione alla spettroscopia NMR bidimensionale. Concetto di coerenza. 5. Esperimenti 2D omonucleari: COSY e varianti, TOCSY, NOESY, ROESY. 6. Spettroscopia di correlazione eteronucleare inversa: INEPT, HSQC, HMQC. 7. Esperimenti 3D eteronucleari. 8. Utilizzo dei parametri NMR per la risoluzione della struttura di peptidi e proteine: pattern caratteristici di particolari strutture secondarie, metodi per calcolo di strutture dai dati NMR e valutazione della loro qualità. 9. Misure di rilassamento e dinamica molecolare. 10. Sistemi complessi: TROSY e deuteroazione per lo studio di proteine grandi. 11. NMR di proteine in sistemi orientati: Residual Dipolar Couplings. 12. Interazioni proteina-proteina e proteina-ligando. 13. Produzione di proteine ricombinanti marcate. 14. Cenni a NMR allo stato solido di proteine.

Modalità di esame:

Esame orale, con la possibilità di concordare con il docente un argomento specifico o un approfondimento da discutere all'inizio dell'esame.

Criteri di valutazione:

La valutazione sarà basata sul grado di comprensione delle metodologie trattate e sulla capacità di contestualizzarle rispetto a problematiche correnti.

Testi di riferimento:

G.S. Rule and T.K. Hitchens, *Foundamentals of Protein NMR Spectroscopy*. : Springer, 2006 J. Cavanagh,, *Protein NMR spectroscopy: principles and practice*. : Elsevier, 2007 Q. Teng, *Structural Biology: Practical NMR Applications*. : Springer, 2005 M.H. Levitt, *Spin Dynamics. Basics of Nuclear Magnetic Resonance*. : Wiley, 2003 J. Keeler, *Understanding NMR Spectroscopy*. : John Wiley & Sons, 2010 T. D. W. Claridge, *High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry*. : Pergamon Press,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Dispense di lezione fornite dal docente. Testi di consultazione disponibili presso la Biblioteca del Dipartimento di Scienze Chimiche ed indicati di seguito.

THEORETICAL CHEMISTRY

Titolare: Dott. DIEGO FREZZATO

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:

Conoscenze di base di chimica, fisica, matematica

Conoscenze e abilità da acquisire:

Il corso è dedicato all'introduzione ai metodi teorici necessari per descrivere i processi molecolari nelle fasi condensate, assieme alla loro applicazione per l'interpretazione delle misure spettroscopiche.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

Lezioni frontali e brevi esercitazioni/dimostrazioni. Il corso si terrà in inglese o in italiano a seconda della presenza di studenti che provengono da scambi internazionali o di specifiche richieste degli studenti che seguono il corso.

Contenuti:

1. Descrizione stocastica dei moti molecolari: teoria dei processi stocastici, equazione di Fokker-Planck ed equazioni differenziali stocastiche; metodi di soluzione numerica; funzioni di correlazione e densità spettrali; cinetiche chimiche stocastiche. 2. Teoria dei responsi lineari: risposta di un sistema classico a perturbazioni deboli. 3. Termodinamica stocastica: teoremi di fluttuazione del lavoro e applicazioni. 4. Leggi di trasformazione sotto rotazione: cambio di rappresentazione di proprietà scalari, vettoriali e tensoriali sotto rotazione del sistema di riferimento; rotazione di campi scalari; dinamiche stocastiche rotazionali. 5. Modelli per la dinamica di sistemi quantistici aperti: matrice densità ed insiemi statistici, equazioni di Bloch, teoria della risposta quantistica per il calcolo di osservabili spettroscopiche, modelli di interazione con l'ambiente e quantum master equations.

Modalità di esame:

Esame orale, con la possibilità di analizzare un problema specifico e discutere una breve relazione su di esso.

Criteri di valutazione:

La valutazione sarà basata sul grado di comprensione delle metodologie formali dimostrato dallo/a studente/essa, e sulla capacità di applicarle a problematiche chimico-fisiche correnti.

Testi di riferimento:

CONTENUTO NON PRESENTE

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Dispense ed appunti di lezione. Testi per consultazione: May, V.; Kühn, O. *Charge and Energy Transfer Dynamics in Molecular Systems: A Theoretical Introduction*. Wiley, 2000. Breuer, H. P. & Petruccione, F. *The theory of open quantum systems*. Oxford University Press, 2002. Zwanzig, R. *Nonequilibrium Statistical Mechanics*. Oxford University Press, New York, 2001. Gardiner, C. W. *Handbook of stochastic methods*, 3rd ed. Springer-Verlag, 2004. Rose, M. E. *Elementary Theory of Angular Momentum*. Dover Publications, 1995.