



UNIVERSITÀ  
DEGLI STUDI  
DI PADOVA



Bollettino Notiziario - A.A. 2024/2025

## LAUREA MAGISTRALE IN CHIMICA (ORD. 2018)

### Curriculum: Chemistry

#### FINAL EXAM

**Titolare:** da definire

**Periodo:** Il anno, annuale

**Indirizzo formativo:** Chemistry

**Tipologie didattiche:** ; 30,00

#### FRONTIERS IN CHEMICAL RESEARCH

**Titolare:** Prof. CHRISTIAN DURANTE

**Periodo:** Il anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Chemistry

**Tipologie didattiche:** ; 8,00

#### INTERNSHIP

**Titolare:** Prof. CHRISTIAN DURANTE

**Periodo:** Il anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Chemistry

**Tipologie didattiche:** ; 10,00

### Curriculum: Chimica

#### DIDATTICA DELLA CHIMICA

**Titolare:** Prof.ssa LAURA ORIAN

**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 - 6 ore di Virtual Exchange: attività online condotta in modalità sincrona (tramite zoom). Lezione/lavoro di gruppo con studenti dell'Università di Bordeaux sul tema "Inglese per l'insegnamento della Chimica".

**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. – Uso della lingua inglese per l'insegnamento della chimica: attività di Virtual Exchange in collaborazione con studenti dell'Università di Bordeaux

**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

**PATENTS, RULES AND PRODUCT DEVELOPMENT**

**Titolare:** Dott. STEFANO MARETTO

**Periodo:** Il anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Chimica

**Tipologie didattiche:** +30E; 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: Complex and data driven chemistry

## ANALYSIS OF COMPLEX CHEMICAL SYSTEMS

**Titolare:** Dott. MARCO ROVERSO

**Periodo:** I anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Complex and data driven chemistry

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

### Prerequisiti:

Sono richieste conoscenze di base di Chimica Analitica e di Chimica Ambientale. Si richiede altresì la conoscenza degli aspetti generali di cromatografia, spettrometria di massa e NMR sono strettamente raccomandati.

### Conoscenze e abilità da acquisire:

Alla fine del corso, gli studenti saranno in grado di: - Comprendere gli approcci analitici non-targeted e confrontarli con approcci analitici convenzionali. - Proporre procedure di preparazione del campione per analisi non-targeted. - Comprendere le tecniche analitiche e gli strumenti di analisi dati utilizzati in ambito omico. - Eseguire analisi dati semplici su set di dati forniti dal docente (analisi qualitativa e quantitativa, valutazione della validazione del metodo, identificazione delle molecole, analisi di base univariata e multivariata) - Proporre strategie non-targeted in relazione ad un problema analitico. - Proporre e discutere un disegno sperimentale e valutare le proposte degli altri studenti.

### Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

Lezioni frontali, esercitazioni in classe e di gruppo, autovalutazione.

### Contenuti:

Definizione di sistema complesso e scienze omiche. Definizione del problema analitico e acquisizione dati. Analisi targeted e non-targeted. Metabolomica e proteomica. Multiomics e data fusion. Sviluppo/ottimizzazione di un workflow analitico (dalla selezione e preparazione dei campioni all'acquisizione e analisi dei dati). Preparazione del campione e metodi di pretrattamento. Estrazione e concentrazione degli analiti. Estrazione in fase solida (SPE), QuEChERS, microestrazione in fase solida (SPME), desorbimento termico. Metodi on-line. Esempi di applicazioni ambientali, cliniche/biochimiche e nel settore alimentare. Spettrometria di massa avanzata e tecniche accoppiate. Cromatografia gassosa (GC) e liquida (HPLC, UPLC). Selezione delle colonne e sviluppo del metodo. Elettroforesi ed elettroforesi capillare. Applicazioni bidimensionali. I sistemi a plasma accoppiato induttivamente (ICP) per l'analisi elementare. Tecniche di ionizzazione e analizzatori di massa. Spettrometria di massa e ad alta risoluzione. Spettrometria di massa tandem. Sviluppo del metodo. Elaborazione Big Data: dai dati grezzi strumentali all'identificazione dei composti. Pre-processing. Esempi di analisi statistica. Analisi degli spettri di massa e identificazione della struttura. Livelli di identificazione. Database e software Procedure di validazione. Esempi su set di dati reali. Esempi di workflow (discussione aperta con gli studenti) relativi ad applicazioni ambientali e biochimiche. Spettroscopia NMR: principi fisici. Lo spettrometro NMR. Raccomandazioni pratiche per la registrazione degli spettri. Spettroscopia NMR mono e bidimensionale: approcci strategici pratici per caratterizzare la struttura chimica dei metaboliti. Interpretazione degli spettri NMR di molecole organiche. NMR quantitativa: diversi approcci per quantificare la concentrazione di metaboliti in matrici complesse. Analisi multivariata dei dati NMR. Approccio mirato e non mirato. Flussi di lavoro tipici dell'analisi metabolomica. Identificazione dei metaboliti. Database dei metaboliti.

### Modalità di esame:

Esame orale. Per l'ammissione è necessario il superamento di un test di prevalutazione scritto (quiz a risposta multipla).

### Criteri di valutazione:

Conoscenza dei principi e dei dettagli strumentali delle strumentazioni illustrate nel corso. Conoscenza delle principali tecniche per l'elaborazione dei dati. Conoscenza della terminologia tecnico-scientifica propria della materia. Capacità di razionalizzare le informazioni apprese per proporre, discutere e valutare un dato approccio analitico non-targeted in relazione ad un problema analitico dato.

### Testi di riferimento:

CONTENUTO NON PRESENTE

### Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Appunti di lezione e materiale didattico reso disponibile su piattaforma moodle. Gli studenti sono pregati di comunicare tempestivamente al docente eventuali necessità al fine di fornire quanto prima il materiale di studio adeguato e di renderlo accessibile a tutti i partecipanti.

## CATALYSIS

**Titolare:** Prof. MARCO ZECCA

**Periodo:** I anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Complex and data driven chemistry

**Tipologie didattiche:** 48A; 6,00

**Conoscenze e abilità da acquisire:**

Il corso introduce i principi di base della catalisi con particolare riferimento ad alcune sue applicazioni tecnologiche e fornisce una panoramica su metodi di preparazione di materiali solidi utili o potenzialmente utili come catalizzatori eterogenei.

**Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:**

Il corso verrà svolto mediante lezioni frontali in presenza (48 ore, in Inglese), con proiezione di diapositive. Si raccomanda comunque agli studenti di raccogliere appunti personali di lezione. Le lezioni non verranno registrate.

**Contenuti:**

Parte 1 (Marco Zecca, 4 CFU) • Definizione di catalizzatore; il concetto di controllo cinetico; il concetto di sito attivo; il ciclo catalitico; turn-over number; turn-over frequency; attività e selettività catalitiche; funzionalità; efficienza atomica. • Le reazioni catalitiche omogenee ed eterogenee: meccanismi ideali; grado di ricoprimento in catalisi eterogenea; adsorbimento dissociativo e molecolare; co-adsorbimento; isoterma di Langmuir; derivazione delle leggi cinetiche; cinetica di Michaelis-Menten; variabilità degli ordini di reazione. • Limitazioni diffusive in catalisi eterogenea: diffusione esterna e interna; efficienza catalitica; modulo di Thiele. • Catalisi omogenea acido-base: pH e funzione di acidità di Hammett; superacidità; idrolisi, condensazione e alchilazione. • Principi di chimica metallorganica applicata dei metalli di transizione: donazione- $\pi$  e retrodonazione- $\pi$ ; legame metallo-CO e metallo-alchene; la regola dei 16-18 elettroni; leganti tipici. • Coordinazione e dissociazione di leganti; addizione ossidativa, eliminazione riduttiva; inserzione migratoria,  $\pi$ - $\pi$  e  $\pi$ - $\pi$  eliminazione. • Idroformilazione degli alcheni; carbonilazione del metanolo ad acido acetico; polimerizzazione stereospecifica di alcheni; metatesi di olefine; reazioni cross-coupling. • Catalizzatori eterogenei: componenti tipici; ruolo del supporto; metodi di preparazione. • Porosità, tortuosità, rugosità nei solidi; dimensioni caratteristiche dei costituenti dei catalizzatori eterogenei (diametro delle particelle, diametro dei pori, volume dei pori) e loro relazioni con l'area superficiale. • Energia superficiale dei solidi; frazione esposta del componente attivo e sua relazione con l'attività catalitica; struttura del reticolo cristallino e della superficie dei metalli; il modello "broken-bond" per l'energia superficiale. • Vita utile dei catalizzatori eterogenei. • Teoria delle bande e chemisorbimento sulla superficie dei metalli; principio di Sabatier; diagrammi a vulcano. • Meccanismo di sintesi industriale dell'ammoniaca; "structure sensitivity"; promotori elettronici. • Meccanismo dell'ossidazione di CO e della riduzione di NO<sub>x</sub>; catalizzatori a "tre vie". • Auto-catalisi. • Chemisorbimento su ossidi semiconduttori e isolanti. • Solidi acidi: punto isoelettrico; struttura dei siti acidi e loro forza in solidi tipici; attivazione di idrocarburi sulle zeoliti (cracking catalitico, alchilazioni). • Catalisi bifunzionale. Parte 2 (Sintesi di solidi inorganici e di supporti per la catalisi eterogenea; Paolo Dolcet, 2 CFU) • Introduzione alla struttura dei materiali inorganici e alla loro classificazione: amorfi; cristallini; polimerici; nanostrutturati; relazione tra il legame chimico e la struttura; difettività nei solidi. • Controllo della morfologia, delle dimensioni e della superficie: anisotropia; costruzione di Wulff. • Area superficiale specifica e sua misura mediante fisisorbimento all'equilibrio: l'isoterma e il metodo BET; il metodo "Temperature Programmed Desorption". • Sintesi in stato solido (meccano-sintesi, sintesi per combustione metodo ceramico, etc.) • Sintesi in fase gas (processo aerosol; pirolisi spray; deposizione chimica da vapore; etc.) • Sintesi in fase liquida: modelli di nucleazione e accrescimento, cristallizzazione classica e non-classica. • Nucleazione in soluzione e accrescimento per insemminazione. • Processi sol-gel. • Sintesi idro- e solvotermali. • Sintesi in flusso. • Sintesi assistite da microonde. • Sintesi assistite da laser; metodi sonochimici. • Sintesi, struttura e proprietà delle zeoliti, delle silici mesoporose e dei "frameworks" metallo-organici (MOFs).

**Modalità di esame:**

Esame orale

**Criteri di valutazione:**

Gli elementi considerati nella valutazione del colloquio orale sono i seguenti: 1) capacità e prontezza di inquadramento degli argomenti in discussione; 2) capacità di sviluppare gli argomenti in discussione in modo autonomo; 3) sicurezza nell'esposizione; 4) livello di dettaglio raggiunto nell'illustrazione degli argomenti in discussione; 5) capacità di collegamento logico fra concetti e argomenti diversi, anche secondo schemi non necessariamente messi in evidenza durante le lezioni; 6) uso appropriato del linguaggio, di concetti teorici e modelli.

**Testi di riferimento:**

AA.VV. (U. Hanefeld, L. Lefferts Editors), Catalysis: An Integrated Textbook for Students. Weinheim (D): Wiley-VCH, 2017

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio:**

Le diapositive proiettate durante le lezioni saranno scaricabili dalla piattaforma di insegnamento a distanza ("moodle") del Dipartimento di Scienze Chimiche. L'uso delle diapositive è consentito esclusivamente agli studenti e alle studentesse e al solo scopo del loro studio individuale per la preparazione dell'esame. La condivisione, la distribuzione e la copia, anche parziali, delle diapositive, tanto con strumenti materiali che digitali, sono rigorosamente vietate.

**CHARACTERIZATION OF COMPLEX CHEMICAL SYSTEM**

**Titolare:** Prof. LUCIO LITTI

**Periodo:** I anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Complex and data driven chemistry

**Tipologie didattiche:** 48A; 6,00

**Prerequisiti:**

Conoscenze di base di matematica/fisica/chimica acquisite nei corsi scientifici fondamentali.

**Conoscenze e abilità da acquisire:**

Il corso introdurrà le conoscenze fondamentali e progressivamente più avanzate circa l'interazione tra materia e radiazioni elettromagnetiche ad energie crescenti. Questi vengono utilizzati per fornire informazioni fondamentali sulla natura intrinseca dei sistemi complessi in termini di composizione e proprietà chimiche. Vengono inoltre fornite introduzioni sugli approcci più comuni nell'analisi dei dati per le tecniche discusse durante il corso.

**Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:**

• Conferenze / seminari su invito di esperti riconosciuti nell'acquisizione/manipolazione dei dati di scavo • Esperimenti simulati di acquisizione e interpretazione dei dati

**Contenuti:**

Parte A: Spettroscopie ottiche e analisi dei big data - Teoria delle interazioni materia/EMR (radiazione elettromagnetica): tipi di interazioni (assorbimento, diffusione, scattering) - Vibrazioni molecolari: modello dell'oscillatore armonico (limiti dell'approssimazione); modi normali di vibrazione (distribuiti lungo l'intera molecola o localizzati su un gruppo funzionale); - Spettroscopia vibrazionale #1 (IR & ATR): teoria di base, regole di selezione, implementazione strumentale - Spettroscopia vibrazionale #2 (Raman): teoria di base (meccanica classica), regole di selezione, implementazione strumentale - Confronto tra spettroscopia IR e Raman: il principio di conservazione dell'energia osservato attraverso le due tecniche; modi attivi IR e/o Raman secondo le regole di selezione; esempi di sistemi più sensibili ad IR o Raman; peculiarità strumentali; - Applicazioni di IR & Raman: acquisizione big data per la calibrazione; tecniche micro-spettroscopiche; Imaging chimico (concetti e scopi); acquisizione big data per l'imaging chimico; - Buone pratiche nell'acquisizione di big data mediante tecniche vibrazionali: la natura del campione (soluzione, superficie, strati, colloide, umido/secco, solventi); figure di merito e come affrontarle (repliche e/o mappature, scelta delle ottiche, scelta dei contenitori/substrati, rapporto segnale/rumore, risoluzione spettrale e spaziale); tipiche procedure post-acquisizione (rimozione del background, baseline, artefatti, normalizzazioni); analisi mono- e multivariata e relativa interpretazione. Parte B: Spettroscopie di radiazione di sincrotrone e raggi X - Radiazione di sincrotrone, potenza irradiata, bending magnets e wigglers, beam-line e stazioni sperimentali. - Spettroscopia fotoelettronica a raggi X (xps), l'effetto fotoelettrico, la scala dell'energia di legame, la sezione d'urto fotoelettrica, l'accoppiamento spin orbita e i doublet terms, i picchi di Auger, la scissione del multipletto, gli effetti dello stato finale, la sensibilità anelastica del cammino libero e della superficie, la misura pratica (scansione di indagini e spettri ad alta risoluzione)

**Modalità di esame:**

L'esame finale consisterà in una prova scritta composta da domande aperte ed a risposta multipla.

**Criteri di valutazione:**

Agli studenti frequentanti è richiesto di essere in grado di discutere e riferire sulle tecniche e concetti affrontati durante il corso con una propria visione critica. Di grande importanza saranno anche la terminologia ed i formalismi utilizzati.

**Testi di riferimento:**

Atkins & De Paula, Atkins' Physical Chemistry. : Oxford University press,

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio:**

Dispense delle lezioni, articoli pertinenti e letture aggiuntive saranno forniti e resi disponibili tramite Moodle

## CHEMOMETRICS

**Titolare:** Prof. LUCA CAPPELLIN

**Periodo:** I anno, 2 semestre

**Indirizzo formativo:** Complex and data driven chemistry

**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, ad esempio quelli forniti nei corsi di Chimica Analitica I e II della Laurea Triennale in Chimica e Chimica Industriale.

**Conoscenze e abilità da acquisire:**

Le lezioni frontali sono dedicate all'acquisizione dei concetti di base della Chemometria ed all'acquisizione di strumenti informatici specifici basati sull'uso di Excel e R per la soluzione di alcuni problemi di base. 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 aziendale 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, Matlab o R. Si consiglia di portare un laptop a lezione.

**Contenuti:**

DISEGNO SPERIMENTALE nei sistemi complessi. Interazioni. Modellazione. Disegni fattoriali. Disegno a facce centrate. Disegni compositi. ANALISI STATISTICA UNIVARIATA. Tipi di errore. Elementi di statistica classica. Distribuzione normale. Distribuzione t di Student. Distribuzione F di Fisher. Distribuzione campionaria della media. Teorema del limite centrale. Inferenza statistica (Test parametrici). Statistiche non parametriche (Test non parametrici). Esempi applicativi utilizzando MATLAB o R. ANOVA per confrontare vari intervalli di confidenza. Calibrazione. Elaborazione e presentazione dei dati. Interpretazione dei risultati. Elenco delle possibili fonti di incertezza. Esempi applicativi. CONTROLLO DELLA QUALITÀ E NORMATIVE. Parametri di prestazione di un metodo analitico. Stima dell'esattezza. Stima della precisione. Diverse approcci alla stima dell'incertezza. Limite di rilevabilità. Limite di quantificazione. Intervallo di linearità. Piano fattoriale di Youden. Valutazione della robustezza del metodo sperimentale. Controlli interni. Controlli esterni. Audit interno per mantenere l'accreditamento del laboratorio secondo UNI CEI EN ISO/IEC 17025. Grafici di controllo. Accredimento e certificazione. Esempi applicativi. ESPLOREAZIONE DEI DATI MULTIVARIATI. Introduzione ai dati multivariati. Pretrattamento dei dati. Dati mancanti. Trasformazione delle variabili. Centrazione. Scaling. Covarianza. Correlazione. Analisi delle componenti principali (PCA). Plot dei carichi. Plot dei punteggi. Selezione delle componenti principali. Plot di Scree. Analisi dei cluster. Matrice delle distanze. Matrice di similarità. Metodi gerarchici agglomerativi. Dendrogrammi. Metodi partizionali. Esempi applicativi. MODELLAZIONE MULTIVARIATA. Linearità del modello. Ordine del modello. Parametri di controllo. Validazione del modello. Modelli di classificazione. Matrice di confusione. Matrice di perdita. Parametri di valutazione della classificazione. Rischio di misclassificazione (MR%). K-NN. Analisi discriminante (DA). Il metodo di classificazione SIMCA. Modelli di calibrazione. Regressione lineare multipla (MLR). Leverage. Coefficienti di regressione. Parametri di valutazione per un modello di regressione. Coefficiente di correlazione. Coefficiente di previsione. Errore standard della stima. Metodi diagnostici per modelli di regressione. Regressione delle componenti principali (PCR). Metodo delle minime quadrature parziali (PLS). Esempi applicativi.

**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:**

Ron Wehrens, Chemometrics with R. Multivariate Data Analysis in the Natural and Life Sciences.. : Springer, 2020

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio:**

Fondamentale sarà l'utilizzo di materiale distribuito dal docente e reso disponibile in rete (Moodle) e degli appunti di lezione. Altri documenti (opzionali) di riferimento/linee guida come: - ISO/IEC 17025:2017. General requirements for the competence of testing and calibration laboratories. Rev. 2023. - ISO/IEC Guide 98-3:2008, Uncertainty of measurement. Part 3: Guide to the expression of uncertainty in measurement (GUM:1995). Rev 2023. - ISO 5725:2023. Accuracy (trueness and precision) of measurement methods and results.

**MULTISCALE CHEMICAL MODELING**

**Titolare:** Prof.ssa SILVIA CARLOTTO

**Periodo:** 1 anno, 2 semestre

**Indirizzo formativo:** Complex and data driven chemistry

**Tipologie didattiche:** 48A; 6,00

**Prerequisiti:**

Matematica: trigonometria, vettori, derivate, integrali. Fisica: concetti di base di elettrostatica (carica, potenziale elettrostatico, campo elettrico). Termodinamica: principi, potenziali termodinamici. Meccanica quantistica: Equazioni di Schrödinger, modelli di particelle in una scatola, rotore rigido, oscillatore armonico, approssimazione di Born-Oppenheimer.

**Conoscenze e abilità da acquisire:**

Conoscenza dei diversi metodi di modellazione dei sistemi molecolari, dal dominio atomistico a quello continuo, e conoscenza di base della connessione statistica tra le quantità termodinamiche macroscopiche (compresi i profili di energia libera e i tassi di reazione) e le proprietà microscopiche. Capacità di identificare le scale temporali e spaziali rilevanti di un dato problema e di proporre modelli e metodi numerici adeguati per il suo studio.

**Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:**

Il corso consta di 48 ore di lezioni frontali durante le quali saranno mostrati casi studio relativi agli argomenti trattati.

**Contenuti:**

Gli obiettivi del corso sono fornire agli studenti una panoramica delle diverse tecniche di modellazione dei sistemi molecolari, dal dominio atomistico a quello continuo, e insegnare le basi della connessione statistica tra le quantità termodinamiche macroscopiche (compresi i profili di energia libera e i tassi di reazione) e le proprietà microscopiche. L'attenzione si concentrerà sull'identificazione delle scale rilevanti per un dato problema e sull'integrazione di diversi modelli e metodi per il suo studio. La teoria sarà spiegata in relazione alle applicazioni della modellazione multiscale a problemi reali nella scienza molecolare e dei materiali. Modelli fisici della materia: dalla meccanica quantistica al moto classico dei nuclei su una superficie di energia potenziale, fino ai modelli continui. Questi modelli saranno applicati a sistemi molecolari isolati e a strutture cristalline periodiche. Meccanica statistica e termodinamica di base: medie temporali e d'insieme, funzioni di distribuzione molecolare, funzione di partizione, insiemi canonici e isoterma-isobarici, fluttuazioni, funzioni di distribuzione all'equilibrio e calcolo delle energie libere. Studio dello spazio delle fasi: Metodi di Montecarlo, campionamento migliorato, dinamiche parziali. Coarse-graining nel tempo e nello spazio. Modelli di rete della dinamica conformazionale: partizione dello spazio di fase in un insieme discreto di stati metastabili, modelli di Markov, equazione master. Caso di studio: trasferimento/trasporto di carica in sistemi (bio)molecolari. La teoria di Marcus del trasferimento di elettroni, l'energia di riorganizzazione e l'approccio computazionale multiscale al problema. Teoria funzionale della densità (DFT) e teoria funzionale della densità dipendente dal tempo (TDDFT), modellazione teorica degli stati eccitati e dei processi di stato eccitato. Metodi ibridi e confine tra descrizioni quantistiche e classiche: modelli di solvatazione, schemi di embedding, meccanica quantistica/meccanica molecolare (QM/MM) e meccanica quantistica/meccanica molecolare/dinamica molecolare (QM/MM/MD). Sistemi periodici: Descrizione geometrica dei solidi. Lattici diretti e reciproci, teoria delle bande dei cristalli, proprietà elettroniche e trattamento dei droganti. Esperimenti di scattering. Tecniche di incorporazione quantistica ab-initio, come l'incorporazione della densità, della matrice di densità e della funzione di Green (GF) e l'incorporazione QM/MM. Caso di studio: descrizione del centro metallico nella materia soffice (enzima QM/MM), applicazione alla spettroscopia (spettri di assorbimento/emissione utilizzando TDDFT ed effetto solvente), catalisi eterogenea (ricerca guidata dall'apprendimento automatico dei siti attivi).

**Modalità di esame:**

Esame orale

**Criteri di valutazione:**

Lo studente sarà valutato sia sul livello delle sue conoscenze teoriche che sulle sue capacità di applicarle per risolvere semplici problemi che vanno dalla meccanica classica alla quantomeccanica.

**Testi di riferimento:**

M Dresselhaus, G Dresselhaus, S Cronin, A Gomes Souza Filho, Solid State Properties From Bulk to Nano. : Springer, 2018 EB Tadmor, RE Miller, Modeling materials: continuum, atomistic and multiscale techniques. : Cambridge University Press, 2013 A Nitzan, Chemical Dynamics in Condensed Phases. : Oxford University Press, 2013 RH Swendsen, An Introduction to Statistical Mechanics and Thermodynamics. : Oxford University Press, 2020

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio:**

Saranno messe a disposizione degli studenti le presentazioni powerpoint utilizzate durante le lezioni.

**ORGANIC SYNTHESIS DESIGN**

**Titolare:** Prof. LUCA DELL'AMICO

**Periodo:** 1 anno, 2 semestre

**Indirizzo formativo:** Complex and data driven chemistry

**Tipologie didattiche:** 48A; 6,00

**Prerequisiti:**

Buone conoscenze di sintesi e chimica organica.

**Conoscenze e abilità da acquisire:**

Il corso intende fornire allo studente i principali strumenti per la pianificazione di strategie sintetiche moderne ed efficaci.

**Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:**

Lezioni frontali. Il corso sarà erogato in lingua inglese.

**Contenuti:**

Chemo-, regio e diastereoselettività nelle trasformazioni organiche. Scambio metallo-alogeno, orto-litiazione. Reazioni di olefinazione e metodi correlati per la costruzione di legami doppi. Reazioni di addizione 1,2-, 1,4- e 1,6-. Metodi di riduzione e ossidazione per l'interconversione dei gruppi funzionali. Diastereoselettività delle reazioni di aldoliche e correlate (Mannich, Michael, Mukaiyama). Principali modelli stereodeterminanti. Reattività degli enolati stabilizzati (enol etere di Mukaiyama, enolati di boro, enolati di stagno). Altre reazioni di carbanione (ilidi di solfonio e solfoxonio, reazione di Julia, reazione di Darzens e trasformazioni correlate). Approcci moderni alla sintesi organica basati su data science. Applicazioni e rilevanza degli esperimenti ad alto numero (THE) e progettazione degli esperimenti nella sintesi di molecole organiche. Approcci sintetici recenti basati su data science.

**Modalità di esame:**

Esame orale. Inizierà con l'esposizione di uno o più articoli concordati con i docenti. Proseguirà poi con una discussione degli argomenti trattati nel corso e/o attraverso l'analisi di una sintesi proposta dai docenti.

**Criteri di valutazione:**

La valutazione sarà basata sul grado di comprensione degli argomenti trattati e sulla capacità di pianificare e discutere strategie di sintesi efficaci.

**Testi di riferimento:**

CONTENUTO NON PRESENTE

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio:**

Diapositive di lezione. Articoli di giornali dalla recente letteratura che trattano argomenti sviluppati in classe.

<b>STATISTICAL LEARNING FOR CHEMISTRY</b>
---

**Titolare:** Prof. ANTONINO POLIMENO

**Periodo:** I anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Complex and data driven chemistry

**Tipologie didattiche:** 40A+10E+48L; 10,00

**Prerequisiti:**

Conoscenze di base di matematica/fisica/chimica acquisite nei corsi fondamentali (chimica/chimica industriale/scienze dei materiali). Il corso non richiede alcuna competenza di programmazione avanzata.

**Conoscenze e abilità da acquisire:**

Il corso ha lo scopo di favorire lo sviluppo delle seguenti capacità: - Comprendere e produrre dati chimici in un formato leggibile dalla macchina - Rappresentare molecole e reazioni in diversi formati chimici - Applicazione di semplici modelli di machine learning a compiti chimici - Valutare se i modelli di apprendimento statistico sono adatti per un dato problema chimico

**Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:**

- Lezioni frontali in aula per la presentazione e la discussione di ogni parte del programma. - Sessioni pratiche in aula per esercizi e applicazioni con esempi di calcolo. - Periodicamente verranno proposti agli studenti test di autovalutazione

**Contenuti:**

Il corso esplorerà le basi dell'apprendimento statistico per caratterizzare, descrivere e simulare sistemi e materiali chimici. Lo scopo del corso è esporre gli studenti ai moderni approcci basati sull'informatica chimica, sull'apprendimento automatico e sull'intelligenza artificiale per la modellazione e la previsione computazionale. L'obiettivo sarà insegnare agli studenti come utilizzare algoritmi e tecniche di apprendimento automatico per analizzare e fare previsioni sui dati chimici. Il corso tratterà argomenti quali le basi dell'apprendimento automatico, gli algoritmi comuni e le loro applicazioni in chimica. Nella prima parte del corso verranno affrontati gli aspetti fondamentali della probabilità e della statistica. Successivamente agli studenti verranno presentate le basi dell'apprendimento computazionale, introducendo la terminologia generale e concentrandosi su metodi e funzionalità lineari. Verranno introdotti metodi e algoritmi di apprendimento supervisionato e non supervisionato per la regressione e la classificazione. Verrà poi illustrato come rappresentare le molecole al computer: rappresentazioni, descrittori e concetti correlati. La seconda parte sarà incentrata sulle reti neurali e sull'applicazione dei modelli di machine learning alla chimica. Sessioni pratiche accompagneranno tutte le attività didattiche, per fornire agli studenti linee guida pratiche su come eseguire esperimenti di machine learning per casi di studio reali, eseguiti con strumenti basati su Python. Lezioni: - Alcune nozioni di statistica e probabilità - Introduzione: terminologia generale del machine learning e machine learning nelle scienze chimiche: classificazione, regressione, apprendimento supervisionato, non supervisionato e per rinforzo - Insieme di dati e scaling: generalizzazione e teoria dell'apprendimento statistico, regolarizzazione; selezione e validazione del modello - Modelli lineari: regressione lineare multipla; bias, normalizzazione, condizione, regolarizzazione; regressione non lineare e trucco del kernel; alberi e foreste casuali - Rappresentazioni di sistemi atomistici: selezione di caratteristiche, filtraggio lineare e altri metodi di selezione; panoramica dei software utilizzati per la rappresentazione chimica - Tecniche di riduzione dimensionale: analisi delle componenti principali - Reti neurali e rappresentazioni apprese: il perceptron multistrato, ottimizzazione e training, regolarizzazione e selezione degli iperparametri - Reti neurali convoluzionali; potenziali di rete neurale; modelli generativi - Argomenti avanzati: apprendimento non supervisionato, deep learning e trasferimento dell'apprendimento in applicazioni chimiche; algoritmi genetici e altri metodi di apprendimento statistico Pratica: - Introduzione a Python in chimica: programmazione Python, librerie rilevanti per applicazioni chimiche (ad esempio Numpy, scikit-learn, PyTorch, DeepChem); Panoramica di Google Colab - Visualizzazione e riduzione delle dimensioni; rappresentazioni molecolari e interconversioni di formato; - Classificazione tramite algoritmo K-nearest neighbors; analisi di regressione - Configurazione e addestramento di una rete neurale - Applicazioni e casi di studio in chimica e scienza dei materiali.

**Modalità di esame:**

Students will be asked to apply their acquired knowledge to a real-world problem in chemistry, by devising a short research project and applying in practice a machine learning method to solve it. Students will work individually or in small groups to complete their projects. They will prepare and submit a written report, which will summarize the objectives, methods, and results of their case studies.

**Criteri di valutazione:**

Il voto finale sarà assegnato sulla base di un relazione scritta e di un esame orale, con le seguenti percentuali: Relazione scritta: 60% Esame orale: 40 %

**Testi di riferimento:**

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio:**

- Dispense delle lezioni, elaborati ed esercizi saranno resi disponibili tramite Moodle - Notebook e strumenti software saranno resi disponibili da fonti aperte (Google Colab, github) - Saranno fornite letture aggiuntive e suggeriti testi di riferimento

**SYSTEMS CHEMISTRY**

**Titolare:** Prof. LEONARD JAN PRINS

**Periodo:** I anno, 2 semestre

**Indirizzo formativo:** Complex and data driven chemistry

**Tipologie didattiche:** 48A; 6,00

**Prerequisiti:**

Concetti di base della chimica organica e chimica fisica Concetti di base della cinetica chimica e della termodinamica

**Conoscenze e abilità da acquisire:**

Lo studente dovrà acquisire familiarità con la preparazione, lo studio e il funzionamento di sistemi chimici complessi e le proprietà che emergono dall'interazione collettiva di molecole in una rete chimica. Lo studente apprenderà i principi fisico-organici che controllano il funzionamento di dispositivi molecolari (sia sintetici che naturali) e materiali sensibili agli stimoli. Lo studente acquisirà familiarità con la nanotecnologia del DNA e i concetti di calcolo chimico.

**Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:**

Il corso sarà svolto con lezioni frontali

**Contenuti:**

Autoassemblaggio all'equilibrio (interazioni non covalenti, multivalenza e cooperatività, progettazione, self-sorting, applicazioni nel riconoscimento molecolare e catalisi, chimica combinatoria dinamica) Autoassemblaggio di non equilibrio (introduzione alla termodinamica del non equilibrio, caratterizzazione degli stati stazionari di non equilibrio: correnti e tasso di produzione di entropia, macchine molecolari biologiche e artificiali: meccanismi a cricchetto, consumo di energia, efficienza, termodinamica e cinetica) Reti di reazioni biologiche e chimiche (motivi della catalisi enzimatica, vie di trasduzione del segnale, meccanismi di feedback, reazioni oscillanti, bistabilità, autoreplicazione) Nanotecnologia del DNA (nanotecnologia del DNA strutturale: termodinamica, formazione di strutture secondarie, reazione di spostamento del filamento, nanotecnologia del DNA funzionale: enzimi del DNA, aptameri, dispositivi e materiali basati sul DNA) Soft Matter (classi: polimeri supramolecolari, assemblaggi a base di tensioattivi, idrogel, polimeri, sistemi di reazione-diffusione, concetto di intelligenza fisica, materiali sensibili alla luce, attuatori, robotica morbida) Calcolo chimico (porte logiche molecolari, calcolo di rete, calcolo neuromorfico)

**Modalità di esame:**

Preparazione di un elaborato scritto sfruttando la letteratura scientifica su un argomento attinente alla 'Chimica dei sistemi' e prova orale

**Criteri di valutazione:**

La valutazione della preparazione dello studente si baserà sulla comprensione degli argomenti svolti, sull'acquisizione dei concetti esposti e sulla capacità di applicarli in modo consapevole

**Testi di riferimento:**

CONTENUTO NON PRESENTE

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio:**

Copie delle slide utilizzate per le lezioni e materiale di approfondimento (pubblicazioni scientifiche) saranno rese disponibili su Moodle.

**Curriculum: Corsi comuni**

**BIO-SPETTROSCOPIA**

**Titolare:** Prof.ssa DONATELLA CARBONERA

**Periodo:** Il anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Tipologie didattiche:** 48A; 6,00

**Prerequisiti:**

nessuno

**Conoscenze e abilità da acquisire:**

Fornire gli elementi culturali di base per l'indagine spettroscopica della struttura e funzione delle proteine, degli acidi nucleici e di loro complessi. Fornire i mezzi per un approccio molecolare alla comprensione dei processi naturali.

**Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:**

Lezioni frontali accompagnate da slides ed esercizi in aula

**Contenuti:**

Contenuti: Il corso si articola nella descrizione di alcuni approcci spettroscopici utilizzati comunemente nello studio di proteine e acidi nucleici. Richiami di Spettroscopia. Stati elettronici. Regole di selezione per le transizioni elettroniche. Momento di Dipolo di transizione. Transizioni vibroniche. Destini degli

stati eccitati. 1) Spettroscopia ottica di assorbimento UV-Visibile. Cromofori proteici e nucleotidici: -Legame peptidico -catene laterali degli residui aromatici -cofattori (vitamine, NAD, FAD, porfirine, carotenoidi etc) -metallo-proteine (emoproteine e citocromi; proteine al rame, centri ferro zolfo – bande a trasferimento di carica) -nucleotidi (effetto ipocromico). Perturbazioni delle proprietà elettroniche causate dall' ambiente locale (pH, costante dielettrica, rigidità mezzo, presenza di gruppi che interagiscono chimicamente, effetto solvente). Perturbazioni causate da interazioni elettroniche con cromofori vicini. Splitting eccitonico. Iper/ipo chromismo. Effetto dello splitting eccitonico nell'assorbimento di strutture secondarie. FOCUS: Come la natura sfrutta questi effetti per ottenere funzioni specifiche e modulare la funzione dei cofattori: ex.1: fotorecettori nel processo della visione ex 2: processo di light harvesting in fotosintesi Tecniche di assorbimento risolte nel tempo - spettri di assorbimento stati eccitati. Ex. GFP: processi fotofisici alla base della emissione verde - trasferimenti di eccitazione ex. Sistemi fotosintetici - processi dinamici: ex. Dissociazione/associazione O<sub>2</sub> nell'emoglobina 2) Dicroismo Circolare Richiami sulla fisica della radiazione elettromagnetica, propagazione nel mezzo e polarizzazione della stessa - OR optical rotation/rotazione ottica. CD circular dichroism/dicroismo circolare. ORD optical rotatory dispersion/ dispersion ottica rotatoria - Grandezze spettroscopiche e Strumentazione. - Attività ottica del cromoforo peptidico. Meccanismo a un elettrone. Meccanismo di accoppiamento elettrico-magnetico. Meccanismo degli oscillatori accoppiati o eccitonico Calcolo CD per dimeri eccitonici - CD di proteine. Strutture secondarie 3) Spettroscopia di Fluorescenza Aspetti generali: Resa quantica di fluorescenza. Stokes shift. Tempo di vita dello stato eccitato e tempo intrinseco di fluorescenza. Quenching di fluorescenza (collisionale e statico). Fluorofori endogeni in biologia (residui aromatici,cofattori). Sonde esogene. SDSL per l'introduzione di cisteine reattive e coupling chimico con sonde molecolari. Sonde organiche comuni. Sonde proteiche (GFP;YFP; CFP etc). Sonde per la rivelazione di ioni, pH, potenziale di membrana. Tecniche Avanzate di fluorescenza. Energy transfer e FRET (Fluorescence Resonance Energy Transfer). Fluorescenza risolta nel tempo. FLIM (fluorescence lifetime imaging spectroscopy), quenching e accessibilità, Immunofluorescenza, Accenni di microscopia confocale, FRAP (fluorescence recovery after photobleaching.) Anisotropia di fluorescenza Applicazioni: Ex. Quenching e cristallino dell'occhio. Ex. FRET e ATP-sintasi Ex FLIM e rivelazione di formazione complesso DNA/RNA-proteine. Ex. Anisotropia di fluorescenza e misura di raggio idrodinamico nella formazione di complessi

**Modalità di esame:**

esame scritto da svolgersi in due ore. Verranno formulate domande a diverso indice di difficoltà per un totale di 30 punti, sul programma svolto. Alcune di queste saranno domande aperte, altre a scelta multipla. Verranno considerati anche esercizi con calcolo numerico.

**Criteri di valutazione:**

Si valuterà la comprensione delle metodologie introdotte nel corso e la capacità di applicazione alla risoluzione di problemi specifici relativi alla struttura e funzione di macromolecole.

**Testi di riferimento:**

CONTENUTO NON PRESENTE

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio:**

Appunti di lezione, materiale messo a disposizione dal docente

## CHEMISTRY OF ORGANIC MATERIALS

**Titolare:** Prof. ENZO MENNA

**Periodo:** I anno, 2 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Tipologie didattiche:** 48A; 6,00

**Prerequisiti:**

Il corso prevede conoscenze di Chimica Organica e Fisica normalmente acquisite negli insegnamenti di Chimica Organica I, II e III, Fisica I e II per la laurea in Chimica.

**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. \*\*Una descrizione più precisa viene riportata nella versione del Syllabus in lingua Inglese

**Modalità di esame:**

Orale in lingua Italiana o Inglese a scelta dello studente. Si chiede allo studente di esporre in modo conciso e rigoroso alcuni argomenti trattati, di collegare tra loro i concetti coinvolti, e di scrivere alla lavagna strutture chimiche, reazioni e formule fisiche.

**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:** 56A+12L; 6,00

**Prerequisiti:**

Non sono previste propedeuticità. Tuttavia, per la frequenza del presente insegnamento sono fondamentali le conoscenze di base di Chimica Analitica e di Chimica Ambientale.

**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. - Introduzione alla valutazione del rischio da inquinanti 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. 1 cfu è dedicato ad esercitazioni di laboratorio riguardanti strumentazione per analisi di inquinanti. 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 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.

**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:**

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

**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, 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:**

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

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio:**

Appunti di lezione. Materiale didattico fornito dal docente o disponibile presso il moodle del corso: <https://stem.elearning.unipd.it/course/view.php?id=8615>

## CHIMICA BIOINORGANICA

**Titolare:** Dott. THOMAS SCATTOLIN

**Periodo:** I anno, 2 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 bioinorganica, ovvero abbondanza e ruolo dei metalli nei processi biologici ed il loro impiego in medicina sia a livello terapeutico che diagnostico.

**Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:**

Lezioni in aula con l'utilizzo di diapositive, filmati e collegamento a siti web. Le lezioni sono tenute in italiano.

**Contenuti:**

Elementi di bioinorganica: Abbondanza e ruolo dei metalli nei processi biologici. Chimica di coordinazione degli ioni metallici nei sistemi viventi: geometria e numero di coordinazione, tipologie di leganti, effetto chelante, aspetti cinetici e termodinamici. Enzimi e catalisi enzimatica. Struttura e funzione di metalloenzimi e metalloproteine (biochimica di ferro, rame, zinco, manganese e nichel). Processi di trasporto/metabolismo dell'ossigeno, catena di trasporto degli elettroni e reazioni di idrolisi. Ruolo degli elementi dei gruppi I e II (Na, K, Mg e Ca) nei sistemi biologici. Complessi metallici coinvolti nella fissazione dell'azoto. Composti organometallici nei sistemi biologici: cobalamine e composti di nichel. Fotosintesi e biochimica del cobalto. Impiego di complessi metallici in medicina (terapia e diagnosi): Patologie e terapie riguardanti alla deficienza o eccesso di metalli essenziali. Composti a base metallica impiegati come antimicrobici, antiartritici ed antivirali. Inibizione di enzimi e metallo-enzimi. Complessi metallici impiegati per il trattamento dei tumori e loro meccanismo d'azione (cisplatino e derivati, complessi di oro, rutenio e recenti scoperte). Cenni di fotofisica dei complessi di coordinazione, nanomateriali e di chimica nucleare. Tecniche di imaging ottiche e diagnosi (fluorescenza, time-gated, super resolution, PET, SPECT, Risonanza magnetica (MRI) e agenti di contrasto, bioluminescenza ed (elettro)chemiluminescenza. Terapia fotodinamica: principi e complessi metallici e nanoparticelle, Radiofarmaci per terapia (radioterapia e radio-immunoterapia, boron neutron capture therapy).

**Modalità di esame:**

Esame scritto

**Criteri di valutazione:**

Lo studente dovrà dimostrare piena conoscenza del programma dell'insegnamento, capacità di ragionamento nel collegare i diversi argomenti trattati e la capacità di illustrare i concetti in modo autonomo e consapevole.

**Testi di riferimento:**

Lakowicz, Joseph R., Principles of fluorescence spectroscopy. New York: Springer, 2006 Silva, J. R. Frausto : da, biological chemistry of the elements the inorganic chemistry of life. Oxford: Clarendon press, 1991 Alessio, Enzo, Bioinorganic Medicinal Chemistry. Weinheim: Wiley-VCH, 2011 Lippard, Stephen J., Principles of bioinorganic chemistry. Mill Valley, CA: University science books, 1994 Bertini, Ivano, Bioinorganic chemistry. Sausalito, Calif: University science books, 1994

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio:**

Le diapositive delle lezioni, i filmati, i collegamenti a siti web e tutto il materiale non protetto dal diritto d'autore saranno forniti attraverso il sito web dell'insegnamento raggiungibile dalla piattaforma e-learning del Dipartimento Chimica (<https://stem.elearning.unipd.it/>). Testi di riferimento.

## CHIMICA DEI MATERIALI INORGANICI

**Titolare:** Dott. MARZIO RANCAN

**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:**

L'obiettivo del corso è quello di sviluppare nello studente la capacità di progettazione, sintesi e caratterizzazione dei materiali inorganici. A tale scopo sono fornite le nozioni di base per la comprensione della struttura dei materiali, e delle relazioni tra strutture, proprietà ed applicazioni. In particolare, il corso fornirà una conoscenza dei principali approcci sintetici innovativi nella chimica dei materiali, dei fattori che regolano le proprietà funzionali dei solidi e di alcune tecniche di caratterizzazione. Il corso è articolato in lezioni frontali (5 CFU) e laboratorio (1 CFU) in modo da applicare le conoscenze acquisite a specifici casi studio.

**Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:**

Lezioni in aula (40 ore), svolte attraverso l'impiego di presentazioni power point. Laboratorio didattico (12 ore): sintesi, caratterizzazione e proprietà funzionali di alcune classi di materiali inorganici visti a lezione.

**Contenuti:**

1. Tecniche di analisi spettroscopiche e microscopiche avanzate per lo studio dei materiali (SEM, TEM, STM, AFM, XRD, XPS/UPS, REELS, adsorbimento di gas). 2. Descrizione e struttura dei materiali inorganici: cristallini, amorfi, polimerici e nanodimensionali, relazione tra tipo di legame chimico e struttura, difettualità nei solidi (con particolare riferimento ai difetti puntuali). 3. Classi di materiali inorganici cristallini, loro principali strutture (strutture a massimo impacchettamento e strutture derivate per riempimento degli interstizi) relazione struttura e proprietà (magnetiche, dielettriche, piezoelettriche, piroelettriche, ferroelettriche). 4. Materiali inorganici amorfi: vetri. Considerazioni termodinamiche e cinetiche per la formazione di vetri. Curve TTT. Principali sistemi inorganici che formano vetri, sintesi di vetri a base di silice e loro principali applicazioni. 5. Materiali porosi: micro-, meso-, e macro-porosi. Sintesi, struttura e proprietà di zeoliti, silice mesoporosa e MOF. 6. Processi di sintesi innovativi: processi da soluzione (tecniche sol-gel), processi da fase vapore (vapore-solido, CVD, PVD, MBE), valutazione critica del ruolo dei precursori molecolari. 7. Materiali inorganici con proprietà ottiche derivanti da assorbimento ed emissione. Ruolo della struttura del materiale, del band-gap, della dimensionalità, dei difetti, dei fenomeni interferenziali, delle transizioni intra-atomiche e a trasferimento di carica (catione-catione, catione-anione). Esempi di materiali inorganici per ognuno dei fenomeni sopra descritti. 8. Materiali e dispositivi funzionali derivanti da proprietà di assorbimento ed emissione: fosfori a lunga durata, generazione di luce bianca, LED, LASER (a rubino, Nd:YAG e a diodo), celle solari, fibre ottiche. 9. Proprietà ottiche degli ioni lantanoidei, progettazione molecolare di sistemi emettitori e loro impiego per applicazioni di sensing, ottiche ed energetiche.

**Modalità di esame:**

Esame Orale

**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 i metodi di sintesi, la composizione, la struttura, le tecniche di caratterizzazione e le proprietà funzionali delle classi di materiali inorganici studiati e delle esperienze di laboratorio.

**Testi di riferimento:**

CONTENUTO NON PRESENTE

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio:**

Indicazioni bibliografiche fornite dal docente in funzione degli argomenti affrontati

## CHIMICA DELLE SUPERFICI E DELLA CATALISI

**Titolare:** Prof. STEFANO AGNOLI

**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 tecniche di caratterizzazione delle superfici 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. Cenni sulla difettualità dei solidi. Introduzione alle Interfasi. Importanza tecnologica delle superfici. Energia interfacciale e termodinamica delle interfasi. Solidi dispersi e area superficiale. 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). Metodologie per lo studio morfologico delle superfici: Atomic Force Microscopy (AFM). Effetto tunnel e Scanning Tunneling Microscopy (STM). Metodi spettroscopici per lo studio delle superfici Sensibilità di superficie, le tecniche di caratterizzazione "operando". Processi di scattering fotone-atomo, elettrone-atomo e ione-atomo. Spettroscopie di fotoelettroni e di ioni. Interfase solido-vuoto e solido-gas. Chemisorbimento e fisisorbimento. Isotherme di adsorbimento. Desorbimento. Desorbimento termico programmato (TPD). Reattività delle superfici. Mobilità delle specie adsorbite. Cinetica delle reazioni in superficie. Esame di alcune reazioni superficiali. casi studio di elettro e foto catalisi.

**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:**

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

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio:**

Dispense e presentazioni 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: velocità di reazione, leggi cinetiche, ordine di reazione. Reazioni chimiche: reazioni elementari, reazioni composite, ipotesi dello stato stazionario. Teorie cinetiche: dipendenza della velocità di una reazione chimica dalla temperatura, da van't Hoff ad Arrhenius, teoria delle collisioni e teoria dello stato di transizione. Catalisi omogenea: catalisi acido-base, catalisi enzimatica, catalisi redox. Catalisi eterogenea: adsorbimento fisico e chimico, reazioni di superficie unimolecolari, reazioni di superficie bimolecolari. Reazioni a catena: sequenza aperta e sequenza chiusa, esempi di reazioni a catena. Si trattano quindi le varie modalità di trasporto di massa. 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-mechaniche; 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. Le conoscenze sulla prima parte del corso verranno verificate in una prova orale, consistente in tre domande aperte, una sulla termodinamica statistica e le altre su due degli argomenti trattati. La seconda parte del corso verrà valutata con una prova scritta ed eventuale integrazione orale. La prova scritta potrà essere svolta attraverso due prove parziali proposte durante il corso.

**Criteri di valutazione:**

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

**Testi di riferimento:**

A. J. Bard, L. R. Faulkner, Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications. : Wiley, 2001 Chorkendorff and J. W. Niemantsverdriet, Concepts of Modern Catalysis and Kinetics, 3rd edition. : , K.J. Laidler, Chemical Kinetics. New York: Harper & Row, 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 chimica generale ed inorganica, chimica fisica, termodinamica e termochimica. Energia libera di Gibbs, entalpia, entropia. Diffusione, leggi di Fick. Conoscenze di base di chimica dei polimeri. Conoscenze relative alla Chimica generale ed inorganica ed ai corsi di chimica inorganica più avanzata (teoria del legame di coordinazione, teoria del campo cristallino, sistematica degli elementi).

**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 particolare enfasi sulla 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. Particolare enfasi verrà posta all'applicazione di principi e concetti di sostenibilità alla sintesi inorganica, ed in particolare agli elementi critici. 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 interattiva ed attività sperimentale in laboratorio.

#### **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 • Principi ed elementi di sostenibilità per la sintesi dei materiali inorganici • Le materie prime critiche: definizione, loro rilevanza e sostituibilità • 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 di base sui metodi CVD) • Formazione di solidi da fase liquida: nucleazione e crescita, modello di La Mer, teorie classiche e non classiche di cristallizzazione, regola delle fasi di Ostwald 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 microfluidica • Sintesi in spazio confinato: microemulsioni, miniemulsioni • Sintesi biogeniche • Approcci al controllo morfologico e dimensionale: anisotropia 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, tomografia di RX. • 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 della 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 e elementi di sicurezza • 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 di tre ore costituita da domande aperte e domande a scelta multipla ed esercizi.

#### **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. Il voto finale sarà la media delle valutazioni dell'esame scritto (70% del voto finale) e della valutazione del laboratorio (30% del voto finale), come descritto in dettaglio nell'introduzione al corso.

#### **Testi di riferimento:**

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

#### **Eventuali indicazioni sui materiali di studio:**

Appunti e presentazioni powerpoint di lezione, articoli e review indicati dai docenti e caricati sul moodle.

## CHIMICA ORGANICA 4

**Titolare:** Prof.ssa MARCELLA BONCHIO

**Periodo:** l'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 ed eventuale 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

**Prerequisiti:**

Conoscenza completa della chimica organica di base.

**Conoscenze e abilità da acquisire:**

L'insegnamento si propone di incrementare le conoscenze riguardanti la stereochimica e l'influenza che essa ha sulle proprietà e la reattività delle molecole organiche. Di fornire i mezzi necessari per comprendere e risolvere problemi legati alla reattività e (stereo)selezione di trasformazioni organiche anche catalitiche per la formazione di legami C-H, C-C e C-eteroatomo in molecole organiche complesse e l'analisi dell'arricchimento enantiomerico e la configurazione dei prodotti.

**Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:**

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

**Contenuti:**

L'insegnamento si suddivide in una prima parte che tratta 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 in una prova scritta per accertare l'avvenuta comprensione e abilità di utilizzare correttamente gli strumenti e metodologie oggetto dell'insegnamento. Inoltre sarà prevista una presentazione orale, anche in gruppo, con discussione in aula di un lavoro di letteratura attinente alle tematiche dell'insegnamento, selezionato all'interno di una serie fornita dai docenti.

**Criteri di valutazione:**

La valutazione si baserà su grado di comprensione e acquisizione dei contenuti e degli argomenti oggetto dell'insegnamento e il loro corretto utilizzo per descrivere e compendere casi reali. Nell'esposizione orale sarà anche valutata la chiarezza della presentazione e dell'esposizione oltre che la proprietà di linguaggio e la capacità di discussione. Sarà valutata la partecipazione attiva durante l'esposizione dei lavori di di letteratura.

**Testi di riferimento:**

Eliel and Wilen, Stereochemistry of Organic Compounds. : Wiley, 1994 Kurt Mislow, Introduction to stereochemistry. Mineola, NY USA: Dover Publication Inc, 2002 Patrick J. Walsh, Marisa C. Kozlowski, Fundaments of Asymmetric Synthesis. Sausalito, California, USA: University Science Books, 2009 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 (<https://stem.elearning.unipd.it/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:**

Concetti chiave della chimica supramolecolare: complessi "host-guest", riconoscimento molecolare, complementarità e pre-organizzazione. Interazioni non covalenti: coppia ionica, ione dipolo, interazioni di Van der Waals, legame a idrogeno, legame ad alogeno, interazioni  $\pi$ , interazioni doantore-accettore, legami covalenti reversibili. Costanti di equilibrio. Studio di un sistema host-guest: isoterme di binding, Job-plot, calorimetria, titolazioni competitive. Termodinamica di binding. Addittività dei contributi. Metodo del doppio mutante. Energia libera di associazione. Effetto del solvente. Autoorganizzazione e cooperatività. Principali host supramolecolari: Podandi, eteri corona, criptandi e sferandi. Principali cavitandi: ciclofani, calixareni, resorcinareni, pillarareni, cucurbiturili, cicloestrine. calixareni, catapinandi, tweezers. Recettori naturali: guanidinio. Membrane e micelle. Catalisi supramolecolare. Rotaxani e catenani. Macchine molecolari. Sistemi supramolecolare fuori dall'equilibrio chimico Chemosensori. Polimeri supramolecolari.

**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, dalle dispense preparate 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 testi in suo possesso sulla chimica fisica organica o nei numerosi trattati di chimica supramolecolare disponibili in commercio.

## CHIMICA TEORICA

**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.

**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.

## 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:**

Il corso si propone di fornire le conoscenze di base e gli strumenti necessari per un approccio razionale e mirato per la comprensione e sviluppo di processi e trasformazioni in chimica organica nell'ambito dei dettami chimica verde e sostenibile. In particolare, verranno illustrati concetti base della chimica verde e sostenibile e verrà mostrato come possano essere utilizzati efficacemente nella sintesi e trasformazione di molecole organiche. Verranno illustrate alcune delle applicazioni della Green Chemistry in chimica organica, come la valorizzazione delle biomasse, l'utilizzo di processi catalitici e solventi green o alternativi, la chimica in flusso per l'intensificazione di processo e alcune tecnologie innovative. Il corso permetterà allo studente di acquisire le seguenti conoscenze di base: - metriche che permettono di misurare l'efficienza chimica e la sostenibilità di un processo chimico. - come valutare l'utilizzo di solventi sicuri e sostenibili. - come ottenere chemicals e carburanti da materiale rinnovabile e di scarto. - come valutare quali metodologie o tecniche utilizzare per ridurre o minimizzare l'impatto ambientale per la produzione di molecole di larga produzione (catalisi, intensificazione di processo, etc) 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 and Sustainable Chemistry". -Essere in grado di valutare i diversi fattori che portano allo sviluppo di un processo più green e sostenibile. -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 anche con attività di active learning, seminari di docenti/ricercatori attivi nel campo ed eventualmente 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.

**Contenuti:**

Principi e Concetti in Green Chemistry. Metriche, Atom Economy, Efficienza e ottimizzazione di processo. Scarti: produzione, problematiche e prevenzione. Tecnologie green innovative: processi in flusso continuo. Intensificazione di processo. Microonde, Sonochimica, Meccanochimica, Fotochimica. Solventi Green: definizione, caratteristiche, ottenimento e usi, GSK's solvent selection guide. Solventi alternativi: CO<sub>2</sub> supercritica, Liquidi ionici e miscele eutettiche, descrizione e applicazioni. Reagenti alternativi: dimetil carbonato, CO<sub>2</sub>. Utilizzo di materia prima rinnovabile e sostenibile. Platform molecules. Derivati degli zuccheri e dei polisaccaridi. Biomassa lignocellulosica. Valorizzazione di scarti industriali ed agricoli. Esempi 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/orale (con domande aperte sui contenuti di base del corso) con eventuale 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 acquisizione dei concetti e tecnologie trattate durante il corso. Sarà verificata anche la capacità di applicare tali concetti e tecnologie nella comprensione e esposizione di un lavoro di letteratura attinente ai contenuti del corso, oltre che alla chiarezza e correttezza della presentazione che verrà fatta utilizzando una presentazione PowerPoint.

**Testi di riferimento:**

Pietro Tundo, Alvise Perosa, Fulvio Zecchini, Methods and reagents for green chemistry. : Wiley, 2007 M. Lancaster, Green Chemistry: An innovative technology. : Royal Chemical Society, 2016

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio:**

Materiale didattico sul sito e-learning del Dipartimento (Moodle DISC) Copie diapositive di lezione, Articoli e reviews di letteratura.

## 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:**

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

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio:**

Dispense di lezione

## ELETTROCHIMICA

**Titolare:** Prof.ssa SABRINA ANTONELLO

**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 elettrodica, processi di trasporto di massa e carica in soluzione, 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 elettrodica. 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 elettrodiche 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. Elettrochimica di specie adsorbite all'elettrodo.

**Modalità di esame:**

Esame scritto

**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 elettrodico.

**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.ssa MARILENA DI VALENTIN

**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:**

J. Keeler, Understanding NMR spectroscopy. : J. Wiley & Sons, 2010 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

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio:**

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

**MAGNETOCHEMICA**

**Titolare:** Prof. MARCO RUZZI

**Periodo:** Il anno, 1 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Tipologie didattiche:** 48A; 6,00

**Prerequisiti:**

Nessuno

**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.

**Criteri di valutazione:**

Esame orale di circa 40 minuti che comprende due domande aperte di carattere generale che hanno lo scopo di determinare il livello di conoscenza raggiunto per i due argomenti principali trattati nel corso. Alcune domande specifiche differenziali permetteranno di valutare le capacità di ragionamento dello studente per problemi affrontati con maggior dettaglio.

**Testi di riferimento:**

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

**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<sub>a</sub>, I<sub>d</sub>, 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. Analisi di alcuni cicli catalitici, con discussione delle caratteristiche dei singoli stadi e correlazione con la struttura degli intermedi proposti: 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, The organometallic chemistry of the transition metals. Hoboken, NJ, USA: Wiley, 2019

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio:**

Diapositive di lezione fornite agli studenti. Testi per consultazione: R. G. Wilkins, Kinetics and Mechanisms of Reaction of Transition Metal Complexes. Wiley. R. H. Crabtree, The organometallic chemistry of transition metals. Wiley.

## 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 della 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:**

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

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio:**

Dispense fornite durante il corso

**METODI FISICI IN CHIMICA ORGANICA**

**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 in aula, in cui i contenuti vengono esposti e applicati nella soluzione di problemi e/o esercizi.

**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 <sup>13</sup>C-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). Accoppiamento di tecniche di mobilità ionica con spettrometria di massa. Applicazione delle tecniche di spettrometria di massa in proteomica, in metabolomica, nell'analisi di complessi non covalenti.

**Modalità di esame:**

Esame scritto comprensivo di domande a risposta multipla, domande aperte ed esercizi.

**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:**

T. D. W. Claridge, High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry. : Elsevier, H. Günther, NMR Spectroscopy. : , 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.,

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio:**

Il materiale didattico presentato a lezione sarà disponibile nel moodle del corso.

**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 di alcuni elementi di meccanica quantistica (operatori, autofunzioni e autovalori, le soluzioni dei più comuni problemi elementari, metodi approssimati). Sono inoltre dati 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 Ziman, John M., Principles of the theory of solids by J. M. Ziman. Cambridge etc.!: Cambridge university press, 1972 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

**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.

## PRINCIPI E APPLICAZIONI DELLA CHIMICA METALLO-ORGANICA

**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 italiana, ma potrà essere tenuto in inglese nel caso in cui venga selezionato da studenti del doppio titolo con l'università di Giessen.

**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 organometallici 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, metallocarbonili, metallocarboni, 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. Hege, "Transition Metals in the Synthesis of Complex Organic Molecules", 2nd ed., University Science Books, Sausalito 1999.

## PROPRIETA' OTTICHE DI SISTEMI MOLECOLARI

**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, Andrei Tokmakoff, Time Dependent Quantum Mechanics and Spectroscopy. Chicago: (free download), 2014

**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.

**QUANTUM CHEMISTRY OF RARE EARTH SYSTEMS**

**Titolare:** Prof. ALESSANDRO SONCINI

**Periodo:** I anno, 2 semestre

**Indirizzo formativo:** Corsi comuni

**Tipologie didattiche:** 48A; 6,00

**Prerequisiti:**

Nozioni di base di calcolo, algebra matriciale, meccanica quantistica, meccanica statistica.

**Conoscenze e abilità da acquisire:**

Capacità di calcolare e analizzare la struttura elettronica e proprietà magnetiche e ottiche di composti di terre rare e di metalli di transizione, utilizzando modelli di crescente complessità e diverse metodologie, incluse teorie della simmetria, del momento angolare in meccanica quantistica, e metodologie di calcolo della chimica quantistica.

**Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:**

Attività didattica frontale, tramite l'utilizzo di strumenti informatici e di lezioni ed esercizi alla lavagna. Si seguirà un percorso graduale che prevede l'illustrazione di argomenti via via più complicati. Hands-on approach to develop problem-solving skills in the modelisation of various properties of materials based on lanthanide compounds, also via the proposition of various case studies from research literature, for which the students will have to set up the appropriate computational modelling strategy.

**Contenuti:**

(A. Soncini e S. Carlotto) - Simmetria, teoria dei gruppi e meccanica quantistica. Teoria del momento angolare (parte 1). Metodi di approssimazione. Cenni di meccanica quantistica relativistica. Effetti relativistici. L'atomo mono-elettronico (atomo idrogenoide). - L'atomo polielettronico. Teoria del momento angolare (parte 2). Base di simmetria per il problema polielettronico: termini di Russel-Saunders. Multipletti di spin-orbita. - Complessi di metalli di transizione e terre rare: teoria del campo cristallino in diversi regimi di accoppiamento di spin-orbita. Origine dell'anisotropia magnetica, e suo effetto sulle proprietà di risposta molecolare magnetica ed elettromagnetica. Complessi polinucleari di ioni metallici ed il problema dell'accoppiamento di scambio. Hamiltoniane di spin. Magneti a singola molecola (SMMs). - Teoria ab initio della struttura elettronica per sistemi di metalli di transizione e terre rare. Base computazionale mono-elettronica: orbitali atomici e orbitali molecolari. Base computazionale polielettronica: Determinanti di Slater e regole di Slater-Condon per il calcolo degli elementi di matrice. Metodi Complete Active Space (CAS) per la parametrizzazione di stati multiconfigurazionali dello ione metallico nel campo dei leganti (problema della correlazione elettronica non-dinamica). Effetti della correlazione elettronica dinamica. - Discussione di problemi di modellizzazione delle proprietà di composti di lantanidi e metalli di transizione, scelti fra le seguenti tematiche: Tecniche di Machine Learning

applicato allo studio delle proprietà elettroniche e di risposta di composti di lantanidi e metalli di transizione. Anisotropia magnetica di SMMs contenenti ioni lantanidi, asfericità della densità elettronica 4f, e loro rilevazione in esperimenti di magnetometria a corrente continua, Inelastic Neutron Scattering, e diffrazione ai raggi X. Rilassamento della magnetizzazione in cristalli di SMMs: modellizzazione del rallentamento della dinamica dissipativa di spin (isteresi magnetica) misurata nella suscettometria a corrente alternata, rilevazione di meccanismi microscopici di accoppiamento spin-fonone, ed effetti quantistici (tunnelling della magnetizzazione). Instabilità Jahn-Teller indotte da un campo magnetico in cristalli di molecular spin rings. Momento toroidale in molecular spin rings, e suo sviluppo come qubit per la computazione quantistica. Stati di accoppiamento magnetico fra elettroni 4f e leganti a carattere radicale, e loro rilevazione in esperimenti di risonanza magnetica e di scattering inelastico di neutroni. Modellizzazione degli stati eccitati a trasferimento di carica in composti a base di lantanidi, e loro impatto su magnetismo e fotofisica. Fenomeni di luminescenza in composti di lantanidi.

**Modalità di esame:**

Una prova orale finale.

**Criteri di valutazione:**

Il livello di conoscenza degli studenti sarà valutato analizzando sia l'acquisizione di specifici concetti appartenenti alla disciplina, sia la capacità di utilizzare le conoscenze maturate mediante la risoluzione di problemi di modellizzazione.

**Testi di riferimento:**

CONTENUTO NON PRESENTE

**Eventuali indicazioni sui materiali di studio:**

Consigliata frequenza costante durante tutto il corso, per acquisire il materiale didattico presentato a lezione e reso disponibile dai docenti.

## STRUTTURA E DINAMICA DI PROTEINE

**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.

**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. Keeler, *Understanding NMR Spectroscopy*. : John Wiley & Sons, 2010 J. Cavanagh,, *Protein NMR spectroscopy: principles and practice*. : Elsevier, 2007 M.H. Levitt, *Spin Dynamics. Basics of Nuclear Magnetic Resonance*. : Wiley, 2003 Q. Teng, *Structural Biology: Practical NMR Applications*. : Springer, 2005 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.