UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PADOVA

SCUOLA DI SCIENZE

Bollettino Notiziario - A.A. 2018/2019

Curriculum: Corsi comuni

BREVETTAZIONE E SVILUPPO DI PRODOTTI

Titolare: Dott. GIANLUCA STOCCO

Periodo: II anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: +30E; 3,00

CHIMICA ANALITICA DEGLI INQUINANTI

Titolare: Prof. ANDREA TAPPARO

Mutuato da: Laurea magistrale in Scienze e Tecnologie per l'Ambiente e il Territorio

Periodo: II anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 32A+24L; 6,00

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

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

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

Contenuti:
Per CHIMICA AMBIENTALE 2 il corso è diviso in due moduli. Il corso mutuato di ANALISI DEGLI INQUINANTI (6 CFU) comprende il secondo modulo (4 CFU) + 2 CFU di laboratorio con esperienze di analisi strumentale applicate a tematiche ambientali. Il primo modulo del corso (32 ore di lezione, 4 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

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

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

Testi di riferimento:

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

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:
Libri di testo consigliati Appunti di lezione. Materiale didattico fornito dal docente o disponibile presso il sito web dei docenti.

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, basilari risulteranno le conoscenze di Chimica Analitica 1 e 2.

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 - Tecniche e Metodologie di analisi di matrici ambientali - Regolamenti europei REACH e CLP

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:
Lezioni d'aula, esemplificazione di alcuni dettagli strumentali, dimostrazioni del funzionamento di alcune strumentazioni.

Contenuti:
Il corso è diviso in due parti. La Prima Parte (40 ore di lezione, 5 CFU) presenta alcuni fra gli aspetti più significativi della chimica dell'atmosfera e dell'inquinamento atmosferico: - 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; - 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. La Seconda Parte (8 ore di lezione, 1 CFU) è dedicata ai Regolamenti REACH e CLP: - i Regolamenti europeo CE 1907/2006 REACH e CE 1272/2008 CLP; la loro applicazione, problematiche e opportunità per il chimico moderno; - Identificazione delle sostanze chimiche secondo REACH.

Modalità di esame:
Orale. E' prevista una prova scritta per la parte REACH-CLP al termine del corso.

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.

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 sito web del docente: http://www.chimica.unipd.it/andrea.tapparo/pubblica/tapparo.htm

CHIMICA BIO-INORGANICA

Titolare: Prof.ssa DOLORES FREGONA

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:
Sono fondamentali buone conoscenze di chimica inorganica.

Conoscenze e abilità da acquisire:
Il corso di chimica bioinorganica si inserisce nell'interfaccia fra la chimica inorganica e la biologia ed ha lo scopo di far conoscere agli studenti della laurea magistrale i principi di chimica di coordinazione impiegati nella ricerca in campo bioinorganico, nonchè la funzione esercitata dagli elementi inorganici classici nella chimica degli esseri viventi, con particolare riguardo sia alla loro chimica in soluzione acquosa e all'importanza delle interazioni non-covalenti in biologia, sia alla struttura molecolare e alla funzione dei complessi metallici con biomolecole. Il corso si articola in tre parti: a) Principi di chimica di coordinazione. b)Studio del ruolo degli elementi inorganici essenziali per le funzioni biologiche. c) La radioattività: nuclidi instabili ed emissioni radioattive, applicazioni in diagnostica e terapia medica.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:
Le lezioni frontali saranno tenute con l'ausilio di diapositive. Gli studenti sono invitati ad essere presenti durante le lezioni e a prendere appunti in quanto i testi esistenti sono molto ampi a dispersivi e dovrebbero servire solo come eventuale approfondimento degli argomenti trattati in aula.

Contenuti:
a)Principi di chimica di coordinazione correlati alla chimica bioinorganic. Aspetti termodinamici e cinetici (Teoria HSAB; effetto chelante e serie di Irving-Williams; velocità di scambio dei leganti; reazioni di sostituzione e di trasferimento elettronico; strutture geometriche degli ioni metallici nei sistemi viventi e numero e geometria di coordinazione, costanti parziali e globali, tipi di leganti, effetto chelante, cenni alla teoria del campo cristallino (Complessi ottaedrici. Teoria del campo dei leganti. LFSE. Complessi a campo forte e debole. Fattori che influenzano il valore di delta. Serie spettrochimica). Energie di

idratazione degli ioni metallici lungo la prima serie di transizione. Cinetica: velocità di reazione; complessi a sfera interna e sfera esterna, reazioni di sostituzione in complessi ottaedrici; meccanismi di Ia e Id, A, D. Reazioni di trasferimento elettronico. Termodinamica ed equilibrio: energia libera, energia di attivazione. Catalisi, catalizzatori biologici. b) Fondamenti di biochimica: proprietà delle molecole biologiche amminoacidi, proteine e loro struttura, acidi nucleici. Gruppi donatori per il legame con il metallo. c)I metalli nei sistemi biologici.Regolazione dei gradienti di concentrazione degli ioni metallici nella cellula. Influenza del metallo nel folding e nel cross-linking delle biomolecole. Esempi di funzioni strutturali e catalitiche del metallo inserito in una proteina. Cofattori speciali e clusters metallici. Metalloenzimi: cofattori, coenzimi e gruppi prostetici. Trasporto degli ioni metallici. Problemi generali di trasporto trans membrana per ioni alcalini e alcalino terrosi e per elementi di transizione. Trasporto passivo: Ionofori e canali ionici (gramicidina, KcsA). Trasporto attivo: pompe ioniche, pompa ionica sodio/potassio, pompa calcio ATPasi. Caratteristiche del ferro(stabilità e solubilità del Fe(II,III); siderofori: idrossamati e catecolati. Transferrina; sito attivo, meccanismo di trasporto, endocitosi. Ferritina e meccanismo di immagazzinamento del ferro. Proteine di trasporto di ossigeno, tipi di legami dell'O2, emoglobina, mioglobina (uptake dell'ossigeno, cambi conformazionali, effetto Bohr), emeretrina ed emocianina. Lo zinco negli esseri viventi: ruolo nei processi enzimatici e nei processi di riconoscimento molecolare (proteine "zinc finger"). Enzimi idrolasi, carbossipeptidasi, fosfatasi alcalina, fosfatasi acida porpurea umana e delle piante. Ciclo di krebs, glicolisi, aconitase, anidrasi carbonica. Ruolo del ferro nei processi enzimatici di trasferimento elettronico. Proteine ed enzimi redox, centri redox più comuni: cluster ferro-zolfo, flavine, centri eme. Proteine Blu-copper. Catena respiratoria mitocondriale: funzionamento, complessi della catena: NAD-deidrogenasi, succinato deidrogenasi, chinone /chinolo, citocromo c, citocromo c reduttasi, citocromo c ossidasi, ATP sintetasi. d)Radioattività: nuclidi radioattivi, carta della stabilità, tipi di emissioni radioattive, numeri magici, cinetica dei decadimenti, famiglie radioattive naturali, applicazione isotopi radiattivi (applicazioni chimiche, analitiche, ciclo del C-14, applicazioni mediche (iodio, tecnezio). Molecole antitumorali, cause del cancro, meccanismi di proliferazione, chemioterapia con piccole molecole ed anticorpi monoclonali, tipi di target cellulari, scoperta e caratteristiche del cisplatino, altri metalli usati in medicina (ferro, mercurio oro, litio, bismuto, gallio, arsenico). Agenti di contrasto per NMR (complessi di gadolinio)

Modalità di esame:
La verifica dell'apprendimento avverrà durante gli appelli ufficiali alle date pubblicate e consisterà in un esame orale.

Criteri di valutazione:
La valutazione della preparazione dello studente avverrà in base alla verifica dell'apprendimento critico degli argomenti svolti ed in base alle capacità di approfondimento personale.

Testi di riferimento:
J.A. Cowan, Inorganic Biochemistry, an introduction.. : Wiley-VCH,, M. R. Roat-Malone, Bioinorganic chemistry: a short course.. : Wiley Interscience, I. Bertini, H. B. Gray, E. I Stiefel, J. S. Valentine, Biological Inorganic Chemistry, structure and Reactivity.. Sausalito,California.: University Science Books, S. J. Lippard, J. M. Berg, Principles of Bioinorganic Chemistry. Mill Valley, California: Ed.University Science Books,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:
Le diapositive delle lezioni saranno messe a disposizione degli studenti.

CHIMICA BIO-ORGANICA

Titolare: Prof.ssa MARINA GOBBO

Periodo: II anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

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

Conoscenze e abilità da acquisire:
Il corso di chimica bio-organica affronta argomenti all'interfaccia tra la chimica organica, la biochimica, la chimica farmaceutica e le biotecnologie. Lo studente acquisirà le competenze necessarie per preparare e modificare con metodologie di tipo chimico importanti biomolecole (in particolare peptidi) da utilizzare anche in contesti tecnologici innovativi (sensoristica e nanotecnologie).

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:
Lezioni frontali.

Contenuti:
Amminoacidi: Generalità e classificazioni. Proprietà chimiche, chimico-fisiche e spettroscopiche. Reazioni degli amminoacidi. Metodi generali di sintesi chimica con cenni alle sintesi industraili, asimmetriche e alla risoluzione dei racemati. Peptidi: classificazione e cenni agli elementi di struttura secondaria delle catene polipeptidiche. Principi di sintesi peptidica: gruppi protettori delle funzioni amminica, carbossilica e delle funzioni in catena laterale; attivazione della funzione carbossilica. Tattica e strategia di sintesi in soluzione e su supporto solido. Sintesi di peptidi ciclici e di piccole proteine anche attraverso tecniche di ligazione. Tecniche di bio-coniugazione nella modifica di proteine e nella funzionalizzazione di sistemi nanostrutturati.

Modalità di esame:
Orale

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

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

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:
Le diapositive utilizzate a lezione verranno messe a disposizione sulla piattaforma di e-learning.

CHIMICA DEI MATERIALI INORGANICI

Titolare: Dott.ssa LIDIA ARMELAO

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

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

Contenuti:
1. Descrizione e struttura dei materiali inorganici: cristallini, amorfi, polimerici e nanodimensionali, principalmente a base di ossidi e solfuri metallici. 2. Classi di materiali inorganici: classe degli spinelli, classe delle perovskiti, silicati, composti di intercalazione, polimeri inorganici e ibridi organico-inorganici, materiali porosi (mesoporosi, zeoliti, aerogel), materiali vetrosi e ceramici. 3. Architetture metallo-supramolecolari discrete ed estese. 4. Correlazioni tra composizione, struttura, proprietà e funzionalità. 5. Processi di sintesi innovativi: processi da soluzione (tecniche sol-gel, idrotermale), processi da fase vapore (vapore-solido, CVD, PVD, MBE), processi aerosol, metodi di sintesi per combustione, reazioni allo stato solido, reazioni di intercalazione. 6. Tecniche di analisi spettroscopiche e microscopiche avanzate per lo studio dei materiali. 7. Proprietà catalitiche e fotocatalitiche, sensoristiche, ottiche, elettriche. Effetti della nanodimensionalità su alcune proprietà funzionali. 8. Materiali inorganici e applicazioni in catalisi e fotocatalisi, energetica, ottica e nanomedicina.

Modalità di esame:
Prova 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 la composizione, la struttura e le proprietà funzionali dei sistemi supramolecolari e delle classi di materiali inorganici studiati.

Testi di riferimento:
Anthony R. West, Solid State Chemistry and its Applications. : John Wiley & Sons, 2014 Ulrich Schubert, Nicola Husing, Synthesis of Inorganic Materials. : John Wiley & Sons, 2005

CHIMICA DEI MATERIALI ORGANICI

Titolare: Prof. ENZO MENNA

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

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

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

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:
Lezioni frontali

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

Modalità di esame:
Orale

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 DELLE SUPERFICI E DELLA CATALISI

Titolare: Prof. GAETANO GRANOZZI

Periodo: II anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

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

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

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:
Attività di aula e visite ai laboratori

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

Modalità di esame:
orale

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 aytonomo e consapevole

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

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:
Dispense e lucidi messi a disposizione degli studenti

CHIMICA FISICA 4

Titolare: Prof.ssa ALBERTA FERRARINI

Periodo: I anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

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

Prerequisiti:
Conoscenze di base di Chimica Fisica e Fisica Generale.

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 fasi condensate, fenomeni spettroscopici (Modulo A), cinetica chimica, cinetica elettrochimica e trasferimento elettronico (Modulo B).

Contenuti:
Modulo A. 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, equazione di stato di fluido di van der Waals. Interazione radiazione elettromagnetica-materia: teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo, probabilità di transizione, regola d'oro di Fermi. Le esercitazioni riguarderanno applicazioni dei metodi sviluppati nella parte teorica del corso. Modulo B. Parte del modulo riguarda la cinetica chimica. Dopo aver richiamato i concetti base, si discute l'effetto della temperatura sulle reazioni chimiche e l'equazione di Arrhenius. Si trattano quindi: la teoria delle collisioni e quella dello stato di transizione; le varie modalità di trasporto di massa; catalisi omogenea ed eterogenea. Un'altra parte del corso riguarda la cinetica elettrodica, con particolare attenzione al controllo da parte del trasporto di massa e del trasferimento di carica. L'applicazione di tali concetti è condotta in

relazione ai metodi elettrochimici più diffusi. Si introduce infine: la teoria di Marcus del trasferimento elettronico, e successive modifiche quanto-meccaniche; effetto della distanza sui trasferimenti elettronici; applicazioni della teoria del trasferimento elettronico a sistemi reali. Nelle esercitazioni di laboratorio si faranno esperimenti atti ad approfondire dal punto di vista pratico i temi suddetti.

Modalità di esame:
Esami scritto ed orale, nonché partecipazione attiva al corso ed alle esercitazioni. Nei test scritti si valuterà la preparazione di singole parti del programma, in modo da favorire un apprendimento immediato e progressivo dei contenuti delle lezioni. Nella prova orale verrà accertata la capacità dello studente di utilizzare le conoscenze e gli strumenti metodologici acquisiti per trattare problemi di interesse chimico.

Testi di riferimento:
A. J. Bard, L. R. Faulkner, Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications. : Wiley, 2001 P.W. Atkins e J. dePaula, Physical Chemistry. : Oxford University Press, 2002

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:
Appunti di lezione. Qualsiasi testo di chimica fisica e di elettrochimica a livello universitario (vedi esempi riportati in basso). Ulteriore materiale, come dispense e copia di diapositive, sarà fornito dal docente.

CHIMICA FISICA DEI FLUIDI

Titolare: Prof.ssa ALBERTA FERRARINI

Periodo: II anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:
Sono considerati preliminari i corsi di Chimica Fisica.

Conoscenze e abilità da acquisire:
Il corso si propone di fornire agli studenti i concetti di base e gli strumenti metodologici per l'interpretazione delle proprietà di fluidi, focalizzandosi in particolare sulla soft matter. Questo termine indica sistemi di tipo diverso (colloidi, soluzioni macromolecolari, cristalli liquidi, polimeri, emulsioni, membrane, ...) che sono largamente usati nella vita quotidiana e nell'industria e rappresentano la gran parte dei costituenti della materia vivente. Il comportamento di questi sistemi complessi può essere compreso utilizzando modelli relativamente semplici, basati su concetti che emergono in considerazione delle scale dei tempi e delle lunghezze in gioco. Nel corso si discuteranno i modelli e gli esperimenti che permettono di comprendere le transizioni di fase, l'organizzazione e le proprietà dei sistemi e di metterle in relazione con la struttura e le interazioni a livello microscopico.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:
Lezioni frontali.

Contenuti:
Nella prima parte del corso verranno introdotti concetti e metodi di termodinamica statistica (distribuzioni statistiche, funzioni di partizione e grandezze termodinamiche). A livello applicativo si esamineranno le fluttuazioni di grandezze su scala microscopica e molecolare, le correlazioni intermolecolari e le proprietà termodinamiche di liquidi semplici. Nella seconda parte del corso, utilizzando i concetti e metodi sviluppati nella prima parte, si tratteranno argomenti quali: - Colloidi e sistemi dispersi e supramolecolari: interazioni efficaci (forze entropiche e di van der Waals, teoria di Poisson-Boltzmann, teoria DLVO), modulazione delle interazioni attrattive (diagrammi di fase di colloidi e di soluzioni di proteine). - Polimeri: proprietà conformazionali ed elastiche di polimeri (modelli di freely-jointed e worm-like chain) e loro determinazione sperimentale (misure di fluttuazioni di forma e stiramento di singolo polimero); separazione di fase liquido-liquido (teoria di Flory-Huggins); transizione coil-globulo. - Sistemi anisotropi: cristalli liquidi, membrane lipidiche. Nel corso si accennerà anche ai metodi sperimentali usati per determinare struttura e ordine di fluidi, con particolare riferimento a tecniche di microscopia e scattering ed esperimenti di singola molecola.

Modalità di esame:
Esame orale.

Criteri di valutazione:
Si valuterà la capacità dello studente di utilizzare le conoscenze acquisite per applicarle a specifici problemi.

Testi di riferimento:
D. Chandler, Introduction to Modern Statistical Mechanics. New York: Oxford University Press, 1987 R. A. L. Jones, Soft Condensed Matter. Oxford: OUP, 2002 R. Piazza, Soft Matter. The Stuff That Dreams Are Made of. Dordrecht: Springer, 2011 I. W. Hamley, Introduction to Soft Matter, Synthetic and Biological Self-assembling Materials. Chichester: Wiley, 2007 J.-P. Hansen , I. R. McDonald, Theory of Simple Liquids with Applications to Soft Matter. Oxford: Academic Press, 2013

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:
I docenti forniranno agli studenti materiale didattico su tutti gli argomenti trattati.

CHIMICA FISICA DEI SISTEMI BIOLOGICI

Titolare: Prof.ssa DONATELLA CARBONERA

Periodo: I anno, 2 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:
Il corso si articola nella descrizione di approcci e di tecniche chimico-fisiche utilizzati nello studio di proteine, sia solubili che di membrana, e di acidi nucleici secondo lo schema seguente: - Spettroscopie ottiche di assorbimento UV-Visibile, di emissione applicate a proteine, cofattori, coenzimi, metallo-proteine e nucleotidi. - Tecniche che utilizzano sonde fluorescenti: Energy transfer e FRET (Fluorescence Resonance Energy Transfer) imaging, quenching, immunofluorescenza, con accenni di microscopia confocale. - Dicroismo circolare e sue applicazioni nello studio conformazionale di proteine. - Tecniche EPR convenzionali ed avanzate per l'indagine strutturale e funzionale in biologia. Applicazioni allo studio di metallo-proteine e di proteine a trasferimento elettronico. Tecnica di spin labelling associata a mutagenesi sito specifica (SDSL) e applicazioni EPR.

Modalità di esame:
esame scritto

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

CHIMICA FISICA DELLO STATO SOLIDO E DEI MATERIALI

Titolare: Prof.ssa CAMILLA FERRANTE

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

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

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

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

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:
L'attività principale si svolge in forma di lezioni d'aula. Viene sollecitata la partecipazione attiva degli studenti riservando tempo a domande e risposte e deviando, di tanto in tanto, dal percorso programmato per introdurre riferimenti a temi attuali e ad attività di ricerca applicativa.

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

Modalità di esame:
Esame orale

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:
G. Strobl, Condensed matter physics. Berlin: Springer, C. Kittel, Introduction to Solid State Physics. New York, Chichester: John Wiley & Sons,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:
Copie delle diapositive utilizzate nel corso delle lezioni saranno scaricabili dalla piattaforma Moodle del dipartimento.

CHIMICA INORGANICA 3

Titolare: Prof. MAURIZIO CASARIN

Periodo: I anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

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

Prerequisiti:
Calcolo differenziale ed integrale. Elementi di meccanica quantistica. Metodo variazionale e teoria delle perturbazioni per stati degeneri.

Conoscenze e abilità da acquisire:
Capacità di prevedere il numero di termini generati da una determinata configurazione elettronica. Capacità di stabilire lo stato fondamentale associato ad una determinata configurazione elettronica. Capacità di prevedere la rimozione della degenerazione orbitalica di un determinato termine in presenza di un campo di potenziale esterno di specifica simmetria. Capacità di assegnare il gruppo puntuale di simmetria ad un determinato complesso di coordinazione. Capacità di indicizzare i livelli elettronici di un composto di coordinazione sulla base delle proprietà di simmetria di quest'ultimo.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:
"Chimica Inorganica 3" si articola in 7 crediti di didattica strutturata frontale e 3 crediti di attivita laboratoristica. Con specifico riferimento alla didattica strutturata frontale, va sottolineato l'uso diffuso di supporti multimediali al fine di rendere quanto più comprensibili possibile gli argomenti trattati. Con riferimento ai 3 crediti di laboratorio, oltre all'attività sperimentale, particolare rilevanza viene data dal titolare dell'insegnamento e dai suoi collaboratori alla stesura delle relazioni. Lo stato di aggiornamento del quanderno di laboratorio di cui ogni studente è fornito è valutato sulla base di almeno due controlli non programmati.

Contenuti:
Teoria dei gruppi in chimica inorganica. Sviluppo formale dell'argomento e delle sue applicazioni per lo studio dei composti inorganici. Proprietà elettroniche, vibrazionali e magnetiche dei complessi dei metalli di transizione. Le lezioni d'aula saranno affiancate da una sessione di laboratorio dedicata al consolidamento delle capacità di sintesi di composti inorganici nonché alla loro caratterizzazione spettroscopica. Argomenti affrontati nel corso delle lezioni d'aula: 1. Elementi di simmetria ed operazioni di simmetria; 2. Definizione di gruppo; 3. Rappresentazioni irriducibili e tavole dei caratteri; 4. Gruppi puntuali; 5. LCAO e teoria di Hückel; 6. Considerazioni generali sullo schema di legame metallo-legante; 7. Orbitali molecolari di frontiera di leganti ?-donatori, ?-donatori e ?-accettori; 8. Complessi ottaedrici ML6 di tipo ?; 9. Complessi ottaedrici ML6 di tipo ?; 10. Campo debole; 11. Campo forte; 12. Diagrammi di Tanabe-Sugano; 13. Applicazione della spettroscopia elettronica allo studio delle proprietà elettroniche dei complessi dei metalli di transizione; 14. Metodo della simmetria discendente

Modalità di esame:
Esame scritto

Criteri di valutazione:
Esame scritto (75% del voto finale). Valutazione delle relazioni di laboratorio (25% del voto finale)

Testi di riferimento:
Gary L. Miessler, Paul J. Fischer, Donald A. Tarr, Inorganic Chemistry. New York: Pearson, 2013

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:
Con la ovvia eccezione dei testi consigliati per l'attività didattica struttura frontale e per quella di laboratorio, i docenti dell'insegnamento mettono a disposizione sul proprio sito tutto il materiale che potrebbe essere di qualche utilità per gli studenti: slides proiettate a lezione, articoli di approfondimento, etc.

CHIMICA INORGANICA AVANZATA

Titolare: Prof. MAURIZIO CASARIN

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:
Solida preparazione in meccanica quantistica.

Conoscenze e abilità da acquisire:
Capacità di calcolare le energie relative dei termini spettroscopici generati da una determinata configurazione elettronica. Capacità di utilizzare indifferentemente i parametri di Slater-Condon ed i parametri di Racah. Capacità di analizzare la struttura elettronica di complessi a campo debole e campo forte. Capacità di utilizzare i diagrammi di Tanabe-Sugano. Capacità di interpretare i diagrami di Van Vleck-Kotani

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:
Chimica Inorganica Avanzata si articola in 6 crediti di didattica strutturata frontale. Tenuto conto della intrinseca difficoltà degli argomenti trattati nel corso, il docente farà un uso intensivo di supporti multimediali.

Contenuti:
Parte I Equazione di Schroedinger; funzioni d'onda radiali (polinomi di Laguerre) ed angolari (armoniche sferiche, polinomi associati di Legendre); orbitali reali come combinazioni lineari di armoniche sferiche; nodi radiali ed angolari; funzioni d'onda polielettroniche; determinanti di Slater; proprietà degli operatori L2, L, L+, L-, S2, S, S+, S- ; accoppiamento Russel-Saunders; configurazioni elettroniche e stati; stati derivanti dalla configurazione elettronica p2, p3, d2; Elementi di matrice di operatori mono e bielettronici; integrali Coulombiani e di Scambio; energie dei termini corrispondenti alla configurazione d2: 3F , 3P, 1G, 1D, 1S; parametri di Slater-Condon per configurazioni del tipo pn (F0, F2) e dn (F0, F2, F4); accoppiamento spin-orbita per sistemi idrogenoidi; accoppiamento spin-orbita per sistemi polielettronici. Parte II Concetto di campo cristallino; campo debole; perturbazione degli stati di uno ione libero ad opera di un campo cristallino debole; sviluppo del potenziale generato da sei cariche negative ai vertici di un ottaedro; ioni con configurazione 3d2 in un campo cristallino ottaedrico; rimozione della degenerazione orbitalica dello stato 3F ad opera di un campo cristallino debole di simmetria ottaedrica; funzioni d'oda relative agli stati T1g, T2g A2g derivanti da uno stato F; campi cristallini di simmetrie diverse da quella ottaedrica; diagrammi di Orgel; crystal field stabilization energy; energie reticolari; raggi ionici; entalpie di idratazione e potenziali redox; spinelli normali e spinelli invertiti; campo forte; pairing energies come combinazione lineare di paranetri di Slater Condon; stati ed energie derivanti dalla configurazione (t2g)2; equivalenza tra elettroni t2g ed elettroni p; metodo della simmetria discendente; diagrammi di correlazione per configurazioni elettroniche dn; diagrammi di Tanabe-Sugano; Teoria dell'orbitale molecolare; serie spettrochimica; orbitali ibridi come combinazione lineare di orbitali atomici; teorema di Jahn-Teller.

Modalità di esame:
esame orale

Criteri di valutazione:

L'esame orale sarà valutato secondo i seguenti criteri: aderenza delle risposte alle domande proposte; esatta distinzione tra quadro generale e nozioni di dettaglio; proprietà e sicurezza di linguaggio.

Testi di riferimento:
J. S. Griffith, The Theory of Transition-Metal Ions. Cambridge: , 2009

CHIMICA ORGANICA 4

Titolare: Prof.ssa MARCELLA BONCHIO

Periodo: I anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

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

Prerequisiti:
Corsi di Chimica Organica fondamentali

Conoscenze e abilità da acquisire:
Disegno e interpretazione della reattività in chimica organica

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:
lezioni frontali e di laboratorio in stretta connessione di contenuti con esercitazioni pratiche mirate e di approfondimento

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

Modalità di esame:
esame scritto e approfondimento orale

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

Testi di riferimento:
Carey, Francis A.; Sundberg, Richard J., > Structure and mechanismsFrancis A. Carey and Richard J. Sundberg. New York etc.: Kluwer, Plenum, 0 Anslyn, Eric V.; Dougherty, Dennis A., Modern physical organic chemistryEric V. Anslyn, Dennis A. Dougherty. Sausalito: University Science Books, 0 Smith, Michael B., March?s advanced organic chemistryreactions, mechanisms, and structureMichael B. Smith. Hoboken: Wiley, 2012

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:
lucidi di lezione e appunti personali

CHIMICA ORGANICA SUPERIORE

Titolare: Prof.ssa GIULIA MARINA LICINI

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

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

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

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

Modalità di esame:
L'esame orale verterà sui contenuti del corso e sulla discussione di un lavoro recente di letteratura attinente alle tematiche del corso. Potrà essere prevista una prova scritta per accertare l'acquisizione dei concetti di base forniti dal corso

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

Testi di riferimento:
Patrick J. Walsh, Marisa C. Kozlowski, Fundaments of Asymmetric Synthesis. Sausalito, California, USA: University Science Books, 2009 Eliel and Wilen,

Stereochemistry of Organic Compounds. : Wiley, 1994 Kurt Mislow, Introduction to stereochemistry. Mineola, NY USA: Dover Publication Inc, 2002

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:
Dispense sul sito e-learning del Dipartimento (Moodle DISC) Articoli e reviews di letteratura

CHIMICA SUPRAMOLECOLARE

Titolare: Prof. FABRIZIO MANCIN

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:
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 enella costruzione di materiali supramolecolari e macchine molecolari.

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

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

Modalità di esame:
L'esame è basato sulla preparazione di un piccolo report, in forma di presentazione orale, a partire da un articolo pubblicato di recente nel settore della chimica supramolecolare. La presentazione del report alla commissione e la successiva discussione consentiranno l'accertamento del profitto di apprendimmento.

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 Nanochemisrty. : Wiley, 2007 J.W. Steed, J.L. Atwood, Supramolecular Chemistry. : Wiley, 2009

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

CHIMICA TEORICA

Titolare: Prof.ssa BARBARA FRESCH

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, funzioni di correlazione e densità spettrali 2. Teoria dei responsi lineari: risposta di un sistema a perturbazioni deboli 3. Proprietà tensoriali e loro leggi di trasformazione 4. Argomenti avanzati di meccanica quantistica: metodi di calcolo di strutture elettroniche (Hartree-Fock, metodi multiconfigurazionali), dinamica di sistemi quantistici aperti e calcolo di osservabili spettroscopiche 5. Termodinamica stocastica: teoremi di fluttuazione del lavoro (relazioni di Jarzynski e Crooks) e applicazioni a trasformazioni in sistemi molecolari

Modalità di esame:
Esame orale, con la possibilità di concordare la discussione di un problema specifico con il docente e di discutere un breve elaborato.

Criteri di valutazione:
La valutazione sara' basata sul grado di comprensione delle metodologie formali dimostrato dallo/a studente/essa, e sulla capacita' di applicarle a problematiche chimico-fisiche correnti.

Testi di riferimento:
CONTENUTO NON PRESENTE

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:
Dispense ed appunti di lezione. Testi per consultazione: Szabo, A., and N.S. Ostlund. Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. Dover Publications, 2012. Weiss, U. Quantum Dissipative Systems. World Scientific, 2008. Zwanzig, R. Nonequilibrium Statistical Mechanics. Oxford University Press, New York, 2001. Gardiner, C. W. Handbook of stochastic methods, 3rd ed. Springer-Verlag, 2004. Rose, M. E. Elementary Theory of Angular Momentum. Dover Publications, 1995. Sekimoto, K. Stochastic Energetics, Lecture Notes in Physics Vol. 799. Springer, 2010.

CONTROLLO E QUALITA' IN CHIMICA ANALITICA

Titolare: Dott. DENIS BADOCCO

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

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 dei corsi 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. Verranno introdotti anche i principi base della diffrazione dei materiali policristallini (diffrazione di polveri). 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 in aula.

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 e coppie di Bijvoet. Strumentazione e tecniche di raccolta dei dati di diffrazione: panoramica, elaborazione dei dati (“data reduction”). Introduzione alla diffrazione dei materiali policristallini (diffrazione di polveri). 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”. Costruzione e affinamento del modello: principi e aspetti pratici. Validazione e analisi del modello: valutazione critica del modello molecolare, accuratezza e valutazione critica della sua qualità. Guida alla lettura di un articolo di “cristallografia”. Esempi di ottenimento della struttura 3D di proteine.

Modalità di esame:
Esame orale.

Criteri di valutazione:
Comprensione degli argomenti trattati e capacità di applicarli.

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

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:
Dispense di lezione

ELETTROCHIMICA

Titolare: Prof. FLAVIO MARAN

Periodo: II anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:
Conoscenze di base di Chimica Fisica, Chimica Organica e Chimica Analitica.

Conoscenze e abilità da acquisire:
Sistemi elettrochimici, fasi ed interfasi elettrochimiche, cinetica elettrodica, reazioni di trasferimento elettronico, microscopie elettrochimiche a scansione di sonda.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:
Lezioni d'aula

Contenuti:
Proprietà generali di equilibrio e non-equilibrio dei sistemi elettrochimici. Proprietà delle soluzioni elettrolitiche. Le superfici metalliche in elettrochimica. Interfase elettrodo-soluzione. Teorie del doppio strato elettrico. Sovratensioni. Cinetica elettrodica. Trasferimento elettronico eterogeneo. Trasporto di massa. Effetto di reazioni chimiche associate al trasferimento elettronico. Competizioni cinetiche. Meccanismi di attivazione. Relazione tra velocità ed energia libera dei processi di trasferimento elettronico. Approfondimento sulle teorie del trasferimento elettronico. Trasferimento elettronico dissociativo. Chemiluminescenza elettrogenerata. Metodi sperimentali più diffusi per lo studio delle cinetiche elettrodiche. Tecniche di microscopia a scansione di sonda, con particolare riguardo ad applicazioni elettrochimiche. Atomic force microscopy. Scanning tunneling microscopy. Scanning electrochemical microscopy.

Modalità di esame:
Test intermedi ed esame finale. Partecipazione attiva al corso, con discussioni.

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

LINGUA INGLESE 2

Titolare: Prof.ssa CAMILLA FERRANTE

Periodo: II anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: ; 3,00

MAGNETOCHIMICA

Titolare: Prof. MARCO RUZZI

Periodo: II anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Conoscenze e abilità da acquisire:
Il corso si propone di fornire le basi per la comprensione delle proprietà collettive di materiali magnetici a partire dalle proprietà magnetiche di atomi, radicali e cluster magnetici (Magnetochemistry), e 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:
Esame scritto.

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

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, Ia, Id, D. Scale di nucleofilicità. Relazioni fra geometria, configurazione elettronica e meccanismo. Sostituzioni nucleofile su composti tetracoordinati a struttura tetraedrica o planare. Effetto trans. Sostituzioni nucleofile su composti esacoordinati. 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. Modifiche della reattività dei leganti per effetto della complessazione: il centro metallico come punto di raccolta dei reagenti e come distributore di densità elettronica nei leganti. Catalizzatori e reazioni catalizzate. Cicli catalitici. Ossidazione controllata degli alcheni; ossidazione dell'etilene ad aldeide acetica (processo Wacker). Idrogenazione degli alcheni. Idroformilazione degli alcheni. Reazioni di carbonilazione: sintesi di acido acetico da metanolo e ossido di carbonio. Reazioni di polimerizzazione. Metatesi di alcheni. Reazione di Heck.

Modalità di esame:
Orale

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

Testi di riferimento:
Crabtree, Robert H., > organometallic chemistry of the transition metalsRobert H. Crabtree. 5. ed. -Hoboken: Wiley, 0

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

MECCANISMI DI REAZIONE IN CHIMICA ORGANICA

Titolare: Prof. CRISTIANO ZONTA

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:
Chimica Organica I,II e III. Nozioni di base di Termodinamica.

Conoscenze e abilità da acquisire:
Fornire gli strumenti teorici e sperimentali per lo studio delle reazioni organiche.

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. Ricapitolazione LFER. Classificazione generale meccanismi di reazione. 2. Metodi sperimentali per lo studio dei meccanismi di reazione. Identificazione Prodotti. Determinazione presenza intermedi (Isolamento/Intrappolamento). Effetto isotopico cinetico e di equilibrio: primario e secondario, esempi e teoria. Evidenze cinetiche. Evidenze stereochimiche. Tecniche analitiche. 3. Metodi teorici per lo studio dei meccanismi di reazione. Introduzione ai metodi computazionali. Calcolo proprietà fisiche (aromaticità, IR, NMR, CD). Studio di stati di transizione. 4. Interazioni non covalenti. Suddivisione tipi di interazione covalente. Modello elettrostatico (Abraham e Hunter). Modello elettrostatico con contributo orbitalico (Energy Decomposition Analysis). Cenni su modelli computazionali. Riconoscimento molecolare e reattività. 5. Meccanismi di reazione: Catalisi Acida, Meccanismi con Metalli, Reazioni Pericicliche. Catalisi elettrofila. Catalisi acida e basica, specifica e generale: implicazioni meccanicistiche. Effetti isotopici in catalisi acida e basica. Meccanismi in presenza di metalli. Meccanismi possibili per le reazioni pericicliche. Diagrammi di correlazione e teoria degli orbitali di frontiera. Cicloaddizioni [4+2] e [2+2]. Trasposizioni sigmatropiche. Cicloaddizioni 1,3-dipolari.

Modalità di esame:
Orale

Criteri di valutazione:
.

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: II anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

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

Conoscenze e abilità da acquisire:
Procedure avanzate di NMR e spettrometria di massa e loro applicazioni.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:
Lezioni frontali

Contenuti:
- Risonanza Magnetica Nucleare: Proprietà magnetiche dei nuclei. Principi operativi e strumentazione. Tecnica ad impulsi con trasformata di Fourier. Parametri di acquisizione. Rilassamento. Equivalenza chimica ed equivalenza magnetica. Spettri del primo ordine e di ordine superiore. Diastereotopismo. Spettroscopia 13C-NMR. Effetto Nucleare Overhauser. Tecniche di spettroscopia NMR di correlazione omo e eteornucleare 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 e DART-MS). Sommario degli analizzatori con esempi di applicazioni. Spettrometria di massa tandem (CID, UVPD, IRMPD, ECD, ETD). Applicazione delle tecniche di spettrometria di massa in proteomica, in metabolomica, nell'analisi di oligonucleotidi, oligosaccaridi e complessi non covalenti. Accoppiamento di tecniche di mobilità ionica con spettrometria di massa.

Modalità di esame:
Esame scritto

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

Testi di riferimento:
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:
Dispense ed appunti di lezione.

PRINCIPI E APPLICAZIONI DELLA CHIMICA METALLO-ORGANICA

Titolare: Prof. ANDREA BIFFIS

Periodo: II 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 presentazioni PowerPoint, fornite agli studenti

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, del gruppo 12 e del boro. 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, metallocarbeni, 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 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 Organometallíc Chemistry of the Transition Metals”, 5th ed., Wiley, New York 2009. “Comprehensive Organometallic Chemistry 3”, M. P. Mingos, R. H. Crabtree (eds.), Elsevier, Amsterdam 2007. “Transition Metals for Organic Synthesis”, M. Beller, C. Bolm (eds.), 2nd ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2004. “Applied Homogeneous Catalysis with Organometallic Compounds”, B. Cornils, W. A. Herrmann (eds.), 2nd ed.,Wiley-VCH, Weinheim, 2002. L. S. Hegedus, “Transition Metals in the Synthesis of Complex Organic Molecules”, 2nd ed., University Science Books, Sausalito 1999.

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 e avanzati.

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 di carica).

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 domende e risposte.

Contenuti:
1. Campi elettromagnetici 2. Proprietà dielettriche di materiali e molecole 3. teoria delle perturbazioni dipendente dal tempo per la spettroscopia 4. Assorbimento, emissione e scattering 5. Proprietà vibrazioni di molecole poliatomiche 6. Transizioni elettroniche e vibroelettroniche: spettroscopia di assorbimento ed emissione di luminescenza. 7. Spettroscopia risolta nel dominio dei tempi per lo studio della dinamica e della fotofisica di sistemi molecolari. 8. Fotofisica e fotochimica degli stati aggregati, 8.a Eccitoni di Frenkel. 8.b Processi non radiativi: Processi di trasferimento di energia, 9. Cenni di spettroscopia ottica non lineare nel dominio dei tempi e delle frequenze.

Modalità di esame:
Esame orale finale

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 strutturali e dinamiche dei sistemi molecolari.

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

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

PROVA FINALE

Titolare: da definire

Periodo: II anno, annuale

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: ; 40,00

SINTESI E REATTIVITA' ORGANICA

Titolare: Prof. TOMMASO CAROFIGLIO

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:
Chimica Organica 4

Conoscenze e abilità da acquisire:
Il corso si propone di ampliare ed approfondire la conoscenza nel campo della sintesi e della reattività di strutture molecolari organiche attraverso l'apprendimento di concetti e metodi che caratterizzano la sintesi organica moderna.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:
Introduction to the strategies for organic synthesis, Laurie S. Starkey, Wiley (2012)

Contenuti:
1. Problematiche generali della sintesi organica. Basi dell'analisi retro sintetica. Metriche chimiche (Economia atomica, Efficienza del carbonio, etc). 2. Sintesi di derivati porfirinici, diadi porfiriniche, oligomeri porfirinici, diadi porfirine-fullerene. In questa parte del corso verranno descritti numerosi esempi di sintesi di derivati porfirinici descritti in letteratura e, contestualmente, verranno richiamate e/o approfondite le classi di reazioni coinvolte nella metodologia sintetica esaminata. 3. Sintesi organiche in flusso in reattori microfluidici. Reagenti chimici e catalizzatori supportati, scavengers. Si descriveranno i vantaggi della sintesi organica in flusso continuo rispetto alle procedure tradizionali "batch". Verranno esaminati in dettaglio alcuni esempi significativi di sintesi organiche condotte in flusso continuo.

Modalità di esame:
Esame scritto con esercizi di retrosintesi

Criteri di valutazione:
Sarà valutata la capacità dello studente di pianificare delle sintesi multistadio "verosimili" e di discutere degli elementi di criticità attesi.

Testi di riferimento:
Laurie S. Starkey, Introduction to strategies for organic synthesis. : Wiley, 2012

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:
Materiale fornito a lezione. Articoli scientifici forniti dal docente.

SPETTROSCOPIE MAGNETICHE

Titolare: Prof. LORENZO FRANCO

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:
Nozioni di base di Fisica e Chimica quantistica.

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

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:
Il corso è basato sulle lezioni d'aula che includeranno esercizi su problemi proposti dal docente anche tratti dalla letteratura scientifica.

Contenuti:
Introduzione alle spettroscopie magnetiche. Caratteristiche della radiazione elettromagnetica. Fenomeni di interazione tra radiazione e materia. Descrizione classica e formalismo quantomeccanico dei momenti magnetici. Proprietà dello spin di elettroni e nuclei. Hamiltoniano di spin. Equazioni di Bloch e rilassamenti di spin. Matrice densità e formalismo degli operatori prodotto. Tecniche impulsate 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, ODMR, EPR risolto nel tempo, EPR ad alto campo-alta frequenza, cenni di EPR impulsato.

Modalità di esame:
Esame orale

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

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:
Dispense di lezione. Durante le lezioni verrà fornita una lista di testi consigliati aggiuntivi.

STRUTTURA E DINAMICA DI PROTEINE

Titolare: Prof. MASSIMO BELLANDA

Periodo: II anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00

Prerequisiti:
Conoscenze di base di chimica fisica e biochimica. Utile il corso di Metodi Fisici in Chimica Organica.

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 per lo studio di macromolecole biologiche 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.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:
Lezioni frontali e brevi esercitazioni

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 deuterazione 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.

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

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

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

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.

TIROCINIO FORMATIVO

Titolare: Prof.ssa CAMILLA FERRANTE

Periodo: II anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: ; 5,00