Universita' degli Studi di Padova

FACOLTA' DI SCIENZE MM.FF.NN.

Bollettino Notiziario

Anno Accademico 2010/2011

Laurea magistrale in Chimica

Programmi dei Corsi

Curriculum: Corsi comuni

C.I. DI CHIMICA FISICA 4

Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto:

CHIMICA FISICA 4 (MOD. A)

(Titolare: Prof.ssa FERRARINI ALBERTA)

Periodo: *I anno, 1 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Tipologie didattiche: *32A+12E; 5,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Prerequisiti :
Conoscenze di base di Chimica Fisica I e II e di Fisica I e II.
Obiettivi formativi :
Fornire agli studenti gli strumenti di base per la comprensione a livello molecolare dei fenomeni spettroscopici e delle proprietà di fasi condensate.
Contenuto dell'attivita' formativa :
- Fondamenti di termodinamica statistica: distribuzioni di probabilità, statistica di Boltzmann, distribuzione delle velocità di Maxwell, equipartizione dell'energia. Applicazioni: proprietà termodinamiche di gas perfetto, equazione di stato di fluido di van der Waals, capacità termica di solidi.
- Cenni sulla struttura dei liquidi e sulla dinamica di molecole e di particelle colloidali in liquidi (equazione di diffusione, relazione di Stokes-Einstein).
- Proprietà elettriche delle molecole (momento di dipolo e momenti di ordine superiore, polarizzabilità); proprietà dielettriche della materia.
- Interazioni intermolecolari: potenziali di interazione di coppia (espressioni in termini di grandezze molecolari e parametrizzazioni fenomenologiche), organizzazione supramolecolare e proprietà di fasi condensate.
- Interazione radiazione elettromagnetica-materia: teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo, probabilità di transizione, regola d'oro di Fermi, coefficienti di Einstein, legge di Beer.
Nelle esercitazioni gli strumenti metodologici sviluppati nella parte teorica del corso verranno utilizzati per risolvere alcuni problemi.
Struttura della verifica di profitto :
Scritta, Orale
Descrizione verifica profitto :
L'esame consisterà in una prova scritta e una prova orale. Il voto del Modulo A farà media con quello del Modulo B.
Testi di riferimento :
Qualsiasi testo di Chimica Fisica, per esempio P.W. Atkins e J. dePaula, VII ed, Oxford University Press.
Ausili didattici :
Dispense sugli argomenti del corso sono disponibili in rete al sito della docente (/www.chfi.unipd.it/~albertaf/).

CHIMICA FISICA 4 (MOD. B)

(Titolare: Prof. MARAN FLAVIO)

Periodo: *I anno, 1 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Tipologie didattiche: *32A+16L; 5,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Prerequisiti :
Conoscenze di base di Chimica Fisica I e II, Chimica Organica e Chimica Inorganica.
Obiettivi formativi :
Tale modulo fornisce gli strumenti per comprendere gli sviluppi moderni della cinetica chimica, della cinetica elettrodica e del trasferimento elettronico.
Contenuto dell'attivita' formativa :
Una parte del modulo riguarda la cinetica chimica. Dopo aver richiamato i concetti base, si discute l'equazione di Arrhenius e l'effetto della temperatura sulle reazioni chimiche. Si trattano quindi la teoria delle collisioni e quella del complesso attivato. Sono trattate anche le varie modalità di trasporto di massa. Sono trattati vari aspetti associati alla reattività chimica. Si discute della dipendenza della velocità di reazione dall'energia libera del processo. Sono trattate sia la catalisi omogenea che quella eterogenea.
Un'altra parte del corso riguarda la cinetica elettrodica e quindi l'analisi della velocità dei vari stadi componenti il processo elettrodico, con particolare attenzione a trasporto di massa e trasferimento di carica. L'applicazione di tali concetti è condotta in relazione ai metodi elettrochimici più diffusi. Si introduce inoltre la teoria del trasferimento elettronico anche con riferimento ad applicazioni nei sistemi reali.
Nelle esercitazioni di laboratorio si faranno esperimenti atti ad approfondire dal punto di vista pratico alcuni dei temi suddetti.

Struttura della verifica di profitto :
Scritta
Descrizione verifica profitto :
L'esame per il modulo B comprenderà una prova scritta finale. Andrà a comporre il voto finale anche la valutazione dell'attività svolta in laboratorio. Il voto del Modulo B farà media con quello del Modulo A.

Testi di riferimento :
Per certi argomenti possono essere utilizzati "Atkins' Physical Chemistry", di P.W. Atkins e J. dePaula, 7a edizione, Oxford University Press, 2002 e "Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications", di A. J. Bard e L. R. Faulkner, 2a edizione, Wiley, 2001. Ulteriore materiale sarà fornito dal docente.

C.I. DI CHIMICA INORGANICA 3

Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto:

CHIMICA INORGANICA 3 (MOD. A)

(Titolare: Prof. TONDELLO EUGENIO)

Periodo: *I anno, 1 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Contenuto dell'attivita' formativa :
Gli ioni dei metalli tipici e di transizione: stabilità in funzione della struttura elettronica e del campo di potenziale esterno. I campi di potenziale in sistemi a simmetria assiale, tetraedrica, quadrata planare, ottaedrica e cubica. La teoria del campo dei leganti e il modello molecolare. Esercitazioni, anche con richiami di teoria dei gruppi puntuali di simmetria, su ioni posti nelle varie geometrie dei poliedri di coordinazione.
Le sintesi per sistemi di ioni a struttura estesa. L'impacchettamento in strutture ordinate verso i solidi cristallini. L'energia reticolare e la costante di Madelung. Il campo di potenziale cristallino e la sua influenza sulle proprietà ottiche e magnetiche degli ioni metallici.
Il legame metallo-metallo. I cluster metallici e i complessi polinucleari. Loro sintesi, stabilità e reattività.
I complessi a ponte di leganti. Il caso dei poliossometallati: sintesi, struttura molecolare, stabilità, formazione dei cluster,e applicazioni in catalisi.
L'impacchettamento in strutture estese verso i solidi vetrosi, a struttura lineare, e lamellare. Le sintesi degli stati aggregati controllate da meccanismi cinetici: metodi Sol-Gel e CVD.
Esercitazioni aventi per oggetto gli ossidi di silicio, di stagno per gli elementi tipici e di zirconio, tantalio e rame per quelli di transizione.
Le nanostrutture inorganiche e le proprietà derivanti dalla nanodimensionalità dei sistemi.

Struttura della verifica di profitto :
Orale
Testi di riferimento :
Appunti di lezione
F.A.Cotton, G.Wilkinson, Advanced Inorganic Chemistry, 1999 VI ed.,Wiley
M.T.Pope, A. Muller, Polyoxometallate Chemistry, 2001, Kluwer
M. Chisholm, The New Chemistry,115-136, 2000, Cambridge University Press

CHIMICA INORGANICA 3 (MOD. B)

(Titolare: Dott. BARRECA DAVIDE)

Periodo: *I anno, 1 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Tipologie didattiche: *8A+48L; 4,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Propedeuticita' :
corsi dei primi tre anni (Laurea triennale).
Obiettivi formativi :
introduzione alla sintesi di sistemi inorganici avanzati con proprietà chimico-fisiche mirate.
Contenuto dell'attivita' formativa :
Il corso verterà sulla sintesi e caratterizzazione chimico-fisica di sistemi inorganici dotati di particolari funzionalità. Lo studente verrà introdotto sia all'utilizzo della convenzionale preparativa per via umida, che all'impiego di tecniche di sintesi di sistemi inorganici funzionali tramite metodologie da fase vapore o da fase liquida. Alle lezioni d'aula saranno abbinate esperienze di laboratorio che verteranno su:
- sintesi di composti di coordinazione e loro caratterizzazione spettroscopica;
- sintesi di strati sottili a base di ossidi tramite la metodologia CVD e studio delle loro proprietà elettrocromiche;
- sintesi e proprietà ottiche di nanoparticelle di solfuri metallici;
- preparazione di sistemi inorganici luminescenti;
- sintesi ed assemblaggio di celle solari e studio delle loro proprietà elettriche.
Particolare attenzione sarà inoltre dedicata alla caratterizzazione dei prodotti ottenuti ed alla correlazione delle loro proprietà alle condizioni di sintesi adottate.
Struttura della verifica di profitto :
Orale
Descrizione verifica profitto :
esame orale e discussione delle relazioni di laboratorio.

Testi di riferimento :
Dispense, appunti di lezione.
Ausili didattici :
articoli scientifici forniti direttamente agli studenti.

C.I. DI CHIMICA ORGANICA 4

Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof. SCORRANO GIANFRANCO (PO) - Presidente*
Dott. SARTOREL ANDREA (Ru) - Membro
Dott. CARRARO MAURO (RuC) - Membro

CHIMICA ORGANICA 4 (MOD. A)

(Titolare: Prof. SCORRANO GIANFRANCO)

Periodo: *I anno, 1 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Prerequisiti :
nessuno
Propedeuticita' :
nessuna
Obiettivi formativi :
Il corso è inteso a completare le conoscenze di base e pratiche della Chimica Organica e in particolare dei tipi di reazione più importanti che lo studente ha già in parte acquisito nel triennio.
Contenuto dell'attivita' formativa :
L'effetto del sostituente nelle reazioni organiche. Definizione delle costanti sigma e valutazione del rho. Struttura e reattività del gruppo carbonilico: reattività con i nucleofili. Sintesi di composti chirali. Definizione R e S. Dispersione ottica rotatoria e dicroismo circolare. La regola dell'ottante. Definizione della configurazione assoluta. Inversione di Walden. Regola di Cram revisionata.
Controllo termodinamico e cinetico nello studio dei meccanismi di reazione. Stati di transizione per reazioni ad uno o più stadi. Applicazione del postulato di Hammond. Entalpia di idrogenazione. Effetto della concentrazione dei reagenti sulle reazioni ad uno o più stadi. Ordine di reazione e meccanismo: la nitrazione del benzene. Espressione della velocità di reazione: effetto del sostituente.
Reazione di nucleofili con il gruppo carbonilico: idratazione di aldeidi e chetoni. Formazione ed idratazione di emi- ed acetali. Catalisi acida generale e specifica. I diagrammi di More O'Ferrall per l'idrolisi degli acetali. Reazioni di nucleofili con derivati degli acidi. Reazioni di nucleofili con le aldeidi e prodotti Cram e anti-Cram. Reazione di Meerwein-Ponndorf-Verley. Riduzioni di aldeidi e chetoni, anche ciclici, con idruri. Diagrammi di More O'Ferrall per le reazioni di carbonili e nucleofili con catalisi acida. Gruppi protettori per CO (acetali), OH (chetali, MOM, t-Bueteri) per NH2 (benzilossicloruri). Somma di ammoniaca e derivati a carbonili. Trasposizione di ossime.
Alcheni: reazioni con idracidi (orientamento, cinetica, meccanismo). Addizione di HX ad acetilene: stereochimica. Velocità relative di somma di alcheni (mono- e di-sostituiti). Reazioni di alcheni con ozono. Diidrossilazione con permanganato o tetrossido di osmio. Ossidazione di
alcheni con peracidi e con altri ossidanti. Ossidazioni di alcoli: bicromato, reattivo di Jones, piridina-triossido di cromo, piridinio cloruro e triossido di cromo. Ossidazione di alcoli primari ad aldeidi con dimetilsolfossido e dicicloesilcarbodiimide oppure ossalilcloruro.
Eliminazioni alfa, E-1, E-2, E1cb. Orientazione Saytzeff e Hoffman. Effetto della base. Diagramma di More O'Ferrall per le eliminazioni. Orientazione in sistemi ciclici. Effetto del solvente. Addizione di bromo agli alcheni. Addizioni elettrofile agli acetilene. Addizione di idrogeno agli alcheni: riduzioni asimmetriche con il catalizzatore di Knowles e di Noyori. Ossidazioni asimmetriche di alcoli allilici con i catalizzatori di Sharpless.
Definizione delle configurazioni R e S in alleni, difenili e dinaftili.

Struttura della verifica di profitto :
Scritta
Testi di riferimento :
F.A. Carey and R.J. Sundberg, "Advanced Organic Chemistry" IV Ed. Plenum Press, 2000.
M. B. Smith, J. March, "March's Advanced Organic Chemistry", VI edizione, Wiley, 2007

Ausili didattici :
materiale fornito a lezione.

CHIMICA ORGANICA 4 (MOD. B)

(Titolare: Dott. CARRARO MAURO)

Periodo: *I anno, 1 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Tipologie didattiche: *+12E+48L; 4,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Obiettivi formativi :
Aquisizione di esperienza nel campo delle metodologie sintetiche e analitiche avanzate applicate alla sintesi organica, alla stereochimica

organica, ed alla caratterizzazione dei prodotti. Acquisizione delle conoscenze necessarie per effettuare una ricerca bibliografica efficace .
Contenuto dell'attivita' formativa :
Studio dell\'effetto del sostituente: correlazione di energlia libera di Hammett.
Reazione multistadio, con uso di gruppi protettori.
Reazione multistadio, con formazione di legame carbonio-carbonio mediante catalisi metallica.
Metodi per la determinazione dell\'eccesso enantiomerico.
Ricerca bibliografica.
Struttura della verifica di profitto :
Orale
Descrizione verifica profitto :
orale, relazioni di laboratorio.
Testi di riferimento :
Appunti di lezione.
Ernest L. Eliel, Samuel H. Wilen Stereochemistry of Organic Compounds, Wiley, New York, 1994.
F.A. Carey and R.J. Sundberg, "Advanced Organic Chemistry" IV Ed. Plenum Press, 2000.

Ausili didattici :
dispense di laboratorio.

CHIMICA ANALITICA DEGLI INQUINANTI

(Titolare: Prof. MARTON DANIELE)

Periodo: *II anno, 1 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof. MARTON DANIELE (PaC) - Presidente*
Prof. TAPPARO ANDREA (PaC) - Membro
Prof. DI MARCO VALERIO (RuC) - Membro

Tipologie didattiche: *40A+16L; 6,00 CFU*

Prerequisiti :
Buona conoscenza dei principi delle tecniche strumentali usate in chimica analitica
Obiettivi formativi :
Obiettivi formativi :Il corso si propone di fornire agli studenti una panoramica sulle metodiche analitiche concernenti le tecniche di campionamento e di pretrattamento dei campioni stessi nell'analisi degli inquinanti. Questo stadio è di particolare rilevanza per il conseguimento di dati accurati nell'analisi di campioni in matrici reali solide, liquide e gassose. Particolare rilevanza verrà data ai principali inquinanti e micro-inquinanti presenti nell'ambientali.
Le esperienze di laboratorio (1 CFU, 16 ore) sono indirizzate alla conoscenza e applicazione delle tecniche di misura e caratterizzazione di inquinanti ambientali: campionatori attivi e passivi per la misura di inquinanti aerodispersi; misura e caratterizzazione del particolato atmosferico; confronto tra differenti per la determinazione degli idrocarburi clorurati nelle acque e la verifica dei valori limite di legge.
Contenuto dell'attivita' formativa :
Tecniche di campionamento, pretrattamento e analisi mediante: estrazione in fase solida (Solid-Phase Extraction), microestrazione in fase solida (Solid-Phase Micro Extraction), spazio di testa statico (Static Head Space) e dinamico (Purge and Trap). Tecniche di mineralizzazione e digestione, estrazione con solventi (Accelerated Solvent Extraction). LC/MS.
Struttura della verifica di profitto :
Orale
Testi di riferimento :
H.H. Bauer "Analisi Chimica Strumentale"
J. Paswliszyn: "Solid phase microextraction – Theory and practice" M. Dekker, 2001
B.V Ioffe: " Head-Space Analysis and Related Methods in Gas Chromatography", John Wiley & Son's, 1999
S.A.S. Wercinki: "Solid Phase Microextraction – A practicalGuide"
W.M.A. Niessen: " Liquid Chromatography-Mass spectrometry", M. Dekker, 2nd edition, 1999
W.M.A. Niessen: " Gas Chromatography-Mass spectrometry" M. Dekker, 2001

CHIMICA ANALITICA E AMBIENTE

(Titolare: Prof. TAPPARO ANDREA) - Mutuato da: Laurea magistrale in Chimica Industriale

Periodo: *I anno, 2 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof. TAPPARO ANDREA (PaC) - Presidente*
Prof. MARTON DANIELE (PaC) - Membro
Prof. DI MARCO VALERIO (RuC) - Membro

Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Prerequisiti :
Buone conoscenze di base di chimica
Obiettivi formativi :
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.
Contenuto dell'attivita' formativa :
Il corso è diviso in due parti. La prima parte (24 ore di lezione, pari a 3 c.f.u.) presenta, senza pretese di sistematicità, alcuni fra gli aspetti più significativi della chimica dell'ambiente, quali in particolare:
- la chimica della stratosfera e il "buco" nello strato di ozono;
- la chimica della troposfera e l'inquinamento atmosferico;
- l'origine e le proprietà del particolato atmosferico;
- i grandi 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 mutamento climatico in atto;
- l'inquinamento da composti organici clorurati;
- l'inquinamento da "metalli pesanti".

La seconda parte (16 ore di lezione, pari a 2 c.f.u.) prende in esame:
- le metodologie analitiche impiegate nello studio della chimica ambientale;
- la problematica dell'inquinamento in ambiente industriale e della tutela della salute dei lavoratori.
- valutazione della qualità delle acque superficiali.

Per ciascuno degli argomenti trattati nelle due parti del corso si farà riferimento alla normativa pertinente (trattati internazionali, legislazione comunitaria, legislazione italiana) e alle principali metodologie analitiche applicabile nello specifico ambito. Alcune dimostrazioni in laboratorio e/o sul campo (1 CFU, 12 ore) consentiranno di operare con alcune semplici strumentazioni impiegate nel campionamenti ed nell'analisi di matrici ambientali, ad esempio:
- campionamento ed analisi di BTEX nell'aria;
- campionamento ed analisi di particolato atmosferico;
- speciazione del particolato atmosferico e valutazione della componente secondaria.

Struttura della verifica di profitto :
Orale
Testi di riferimento :
R.A. Bailey et al. – Chemistry of the Environment – Academic Press, 2002
C. Baird – Chimica ambientale – Zanichelli, 1997
S.E. Manahan – Chimica dell'ambiente – Piccin, 2000
G.W. vanLoon, S.J. Duffy – Environmental Chemistry – Oxford University Press, 2000
Ausili didattici :
Appunti di lezione forniti dal docente.

CHIMICA BIO-INORGANICA

(Titolare: Prof.ssa FREGONA DOLORES)

Periodo:	*I anno, 2 semestre*
Indirizzo formativo:	*Corsi comuni*
Commissione di profitto:	*Prof.ssa FREGONA DOLORES (PaC) - Presidente* *Dott. RONCONI LUCA (Ru) - Membro*
Tipologie didattiche:	*48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento :	*Dipartimento di Scienze Chimiche*

Obiettivi formativi :
Questo corso caratterizzante ha lo scopo di far conoscere agli studenti della laurea magistrale i principi di chimica di coordinazione impiegati nella ricerca bioinorganica ed il ruolo degli ioni metallici presenti nei sistemi biologici in quantità elevate o in traccia, sia dal punto di vista chimico che strutturale. Il corso tratta del ruolo delle specie inorganiche, endogene ed esogene, "in vivo" in relazione alla posizione da loro occupata nel Sistema Periodico 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.
Contenuto dell'attivita' formativa :
Richiami alle nozioni fondamentali di chimica di coordinazione e principi usati nella ricerca bioinorganica. Scopi e metodi. Aspetti termodinamici e cinetici. Strutture elettroniche e geometriche di ioni metallici nei complessi con biomolecole. Teoria del campo dei leganti e Serie spettrochimica con applicazioni.
Classificazione degli elementi, in base a criteri biomedici, in essenziali, utili e tossici. Biodisponibilità e funzione biologica degli elementi dei gruppi principali e dei gruppi di transizione.
Funzioni di deposito, di trasporto e di biomineralizzazione di ioni dei metalli alcalini e alcalino-terrosi e dei metalli di transizione.
Leganti tetrapirrolici: macrocicli della porfirina e della corrina. Assunzione, deposito e trasporto di diossigeno. Eme ed emoproteine: emoglobina, mioglobina e citocromi. Clorofilla e centri fotosintetici di magnesio e di manganese. Cobalammine, vitamina B12 e coenzima B12.
Acidi nucleici (RNA e DNA), proteine e loro costituenti come leganti biologici. Ruolo degli ioni metallici. Influenza dei metalli sulla conformazione e il cross-linking nelle biomolecole. Siti di coordinazione, geometria e struttura molecolare dei complessi metallici.
Funzioni delle metalloproteine contenenti centri di ferro, di rame e di zinco. Metalloproteine con funzioni di trasferimento elettronico: citocromi e proteine ferro-zolfo, clusters metallici. Funzioni dei metalloenzimi, proprietà catalitiche e strutturali del centro metallico nel sito attivo, geometrie di coordinazione e meccanismi di azione enzimatica con esempi: anidrasi carbonica, carbossipeptidasi, superossidodismutasi di rame e zinco e alcoldeidrogenasi.
Metalli in medicina. Impiego di complessi del tecnezio (99mTc) per scopi diagnostici, di complessi di platino (cisplatino) come farmaci antitumorali e di complessi di oro come agenti antiartritici.
Struttura della verifica di profitto :
Orale

Descrizione verifica profitto :
l'accertamento avverrà con colloqui.
Testi di riferimento :
I. Bertini, H. B. Gray, S. J. Lippard, J. S. Valentine "Bioinorganic Chemistry", Ed. University Science Books Mill Valley, California
S. J. Lippard, J. M. Berg "Principles of Bioinorganic Chemistry", Ed.University Science Books Mill Valley, California
Ausili didattici :
fotocopie distribuite ad integrazione degli appunti di lezione.

CHIMICA BIO-ORGANICA

(Titolare: Prof. TONIOLO CLAUDIO)

Periodo: *I anno, 2 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof. TONIOLO CLAUDIO (PO) - Presidente*
Prof. FORMAGGIO FERNANDO (PO) - Membro
Dott. MORETTO ALESSANDRO (RuC) - Membro

Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Prerequisiti :
È opportuno che lo studente abbia superato gli esami di Chimica Organica I, II e III.
Contenuto dell'attivita' formativa :
Il corso verrà tenuto in lingua inglese.

Amminoacidi: Generalità e classificazioni. Metodi generali di sintesi chimica. Risoluzione dei racemati. Sintesi asimmetriche. Proprietà chimiche, chimico-fisiche e spettroscopiche.
Peptidi: Sintesi di peptidi: tattica e strategia. Gruppi protettori delle funzioni amminica e carbossilica e delle funzioni in catena laterale. Attivazione della funzione carbossilica. Racemizzazione. Sintesi su polimeri insolubili e solubili. Chimica combinatoriale. Sintesi per mezzo di enzimi. Semisintesi. Struttura del legame peptidico. Tipi di forze che determinano le strutture secondarie. Mappa conformazionale di Ramachandran. Strutture secondarie ordinate e ripiegamenti. Denaturazione. Metodi chimico-fisici e spettroscopici per studiare le strutture secondarie. Proteine fibrose (fibroina, collagene, cheratina e miosina, elastina).

Struttura della verifica di profitto :
Orale
Testi di riferimento :
G.C. Barrett, "Chemistry and Biochemistry of the Amino Acids", Chapman and Hall, 1985
J. Jones, "The Chemical Synthesis of Peptides", Oxford Science, 1991

Ausili didattici :
appunti di lezione.

CHIMICA DEI MATERIALI INORGANICI

(Titolare: Dott.ssa ARMELAO LIDIA)

Periodo: *I anno, 2 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Dott.ssa ARMELAO LIDIA (PrCr) - Presidente*

Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Contenuto dell'attivita' formativa :
1. Descrizione e struttura dei materiali inorganici: cristallini, amorfi, polimerici e nanostrutturati (principalmente a base di ossidi e solfuri metallici)
2. Correlazioni tra struttura, proprietà e funzionalità
3. Processi di sintesi: processi di cristallizzazione da fuso, biomineralizzazione, processi da soluzione (precipitazione, sol-gel, idrotermale), processi da fase gassosa (vapore-solido, CVD), processi aerosol, metodi di sintesi per combustione, reazioni allo stato solido, reazioni di intercalazione
4. Classi di materiali inorganici: composti di intercalazione, polimeri inorganici (siliconi, polisilani, fosfazeni, etc.) e ibridi organico-inorganici, materiali porosi (mesoporosi, zeoliti, aerogel), materiali vetrosi e ceramici
5. Proprietà catalitiche e fotocatalitiche, (bio)sensoristiche, termiche, elettriche
6. Materiali inorganici per applicazioni in catalisi e fotocatalisi, energetica, salvaguardia ambientale, fotonica e biomedicina
Struttura della verifica di profitto :
Da definire

CHIMICA DEI MATERIALI ORGANICI

(Titolare: Prof. MENNA ENZO)

Periodo: *I anno, 2 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof. MENNA ENZO (Pa) - Presidente*
Prof. MANCIN FABRIZIO (Pa) - Membro
Prof. MAGGINI MICHELE (PO) - Membro

Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Prerequisiti :
È opportuno che lo studente abbia superato gli esami di Chimica Organica I, II e III.
Obiettivi formativi :
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.
Contenuto dell'attivita' formativa :
Il corso verrà tenuto in lingua inglese.

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.

Struttura della verifica di profitto :
Orale
Ausili didattici :
Saranno fornite agli studenti dispense e rassegne di letteratura sugli argomenti trattati.

CHIMICA FISICA DEI FLUIDI

(Titolare: da definire) Insegnamento non attivato per l'a.a 2010/2011

Periodo: *II anno, 1 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof. MORO GIORGIO (PO) - Membro*

Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Prerequisiti :
Sono considerati preliminari i corsi di Chimica Fisica.
Obiettivi formativi :
Il corso si propone di fornire agli studenti i concetti di base e i metodi per l'interpretazione quantitativa delle proprietà dei fluidi. Si discuteranno i modelli e gli esperimenti che permettono di comprendere le transizioni di fase, l'organizzazione e le proprietà dei sistemi fluidi e di metterle in relazione con la struttura e le interazioni a livello atomico. Si partirà dai liquidi semplici per arrivare ai fluidi complessi, che comprendono sistemi di interesse in campo biologico e tecnologico, quali membrane, biopolimeri, polielettroliti e colloidi.
Contenuto dell'attivita' formativa :
Nella prima parte del corso verranno introdotti i metodi della termodinamica statistica (distribuzioni statistiche, funzioni di partizione e grandezze termodinamiche) e le tecniche sperimentali (diffrazione di raggi X e neutroni, effetto Kerr) per lo studio della struttura e dell'ordine nei liquidi.
Nella seconda parte del corso verranno prese in esame applicazioni a problemi di interesse chimico che, anche sulla base dell'interesse degli studenti, verranno scelte tra le seguenti:
- Solvatazione: modello di Onsager per soluti polari; equazione di Poisson-Boltzmann e modello di Born per soluti carichi.
- Tensione superficiale: descrizione macroscopica e modello di van der Waals.
- Cristalli liquidi e cristalli colloidali: ordine traslazionale e orientazionale, transizioni di fase ordine-disordine.
- Polimeri e proprietà conformazionali: flessibilità e dimensioni di catene polimeriche, transizione coil-globulo.
- Membrane lipidiche: curvatura ed elasticità.

Struttura della verifica di profitto :
Orale
Ausili didattici :
Materiale didattico verrà fornito dai docenti.
Per approfondimenti:
a. B. Widom, Statistical Mechanics, a concise introduction for chemists, (CUP, Cambridge, 2002)
b. J.L. Barrat, J.-P. Hansen, Basic concepts for simple and complex liquids (CUP, Cambridge, 2003)
c. I.W. Hamley, Introduction to Soft Matter : Polymers, Colloids, Amphiphiles and Liquid Crystals (Wiley, New York, 2000)
d. R.A.L. Jones, Soft Condensed Matter (OUP, Oxford, 2002)

CHIMICA FISICA DEI SISTEMI BIOLOGICI

(Titolare: Dott.ssa DI VALENTIN MARILENA)

Periodo: *I anno, 2 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof.ssa CARBONERA DONATELLA (PaC) - Presidente*
Dott.ssa DI VALENTIN MARILENA (RuC) - Membro

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

Obiettivi formativi :
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.

Contenuto dell'attivita' formativa :
Il corso si articola nella descrizione di approcci e di tecniche chimico-fisiche utilizzate 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.
Struttura della verifica di profitto :
Da definire
Ausili didattici :
Appunti di lezione, materiale messo a disposizione dal docente

CHIMICA FISICA DELLO STATO SOLIDO E DEI MATERIALI

(Titolare: Prof. BOZIO RENATO)

Periodo: *I anno, 2 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof. BOZIO RENATO (PO) - Presidente*

Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Contenuto dell'attivita' formativa :
Il corso verrà tenuto in lingua inglese.

1. Forze intermolecolari e auto-organizzazione nelle nanostrutture.
2. Forze intermolecolari ed energie coesive nei solidi.
3. Simmetria traslazionale nei cristalli. Reticoli di Bravais. Spazio reciproco e reticolo reciproco. Diffusione di radiazione nei solidi.
4. Struttura e dinamica nei cristalli. Fononi ed elettroni. Curve di dispersione e bande di energia.
5. Interazioni tra particelle e quasi-particelle nei solidi. Diffusione e localizzazione. (2 ore)
6. Disordine, difetti e superfici.
7. Proprietà meccaniche, dielettriche, ottiche e magnetiche nei materiali e nelle nanostrutture.
Struttura della verifica di profitto :
Orale
Testi di riferimento :
appunti di lezione.

CHIMICA INORGANICA AVANZATA

(Titolare: Prof. CASARIN MAURIZIO)

Periodo: *I anno, 2 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof. CASARIN MAURIZIO (PO) - Presidente*

Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Contenuto dell'attivita' formativa :
Il corso verrà tenuto in lingua inglese.

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 Jan Teller.
Struttura della verifica di profitto :
Orale

CHIMICA ORGANICA SUPERIORE

(Titolare: Prof. MAGGINI MICHELE)

Periodo: *I anno, 2 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof. MAGGINI MICHELE (PO) - Presidente*
Prof.ssa LICINI GIULIA MARINA (St) - Membro

Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Contenuto dell'attivita' formativa :
Nella prima parte del corso, tenuta da M. Maggini, saranno affrontate le reazioni pericicliche e sarà presentata e discussa la chimica dei fullereni, dei nanotubi di carbonio e del grafene. In particolare saranno esaminate le reazioni elettrocicliche (butadiene-ciclobutene, cicloesatriene-1,3,5-triene); le trasposizioni sigmatropiche: migrazione [1,3], [1,5], [3,3] di idrogeno termica e fotochimica e migrazione [1,3] e [1,5] di carbonio e le reazioni di cicloaddizione: regole di Woodward-Hoffmann, regioselettività, principio dell'addizione sin e endo. Successivamente sarà esaminata la sintesi e saranno enunciati i principi generali di reattività dei fullereni, dei nanotubi di carbonio e del grafene (funzionalizzazione organica e applicazioni dei derivati nel campo della scienza dei materiali e della chimica medicinale)

Nella seconda parte del corso, tenuta da G. Licini, verranno trattati argomenti che riguardano la catalisi stereo selettiva. Verranno descritti gli aspetti più generali (sintesi stereo selettiva, risoluzione cinetica, desimmetrizzazioni, deracemizzazioni, autocatalisi, effetti non lineari) e verranno poi esaminati più in dettaglio alcuni processi catalici importanti nell'ambito della catalisi metallica, organo catalisi e catalisi enzimatica per la formazione stereo selettiva di legami carbonio carbonio e carbonio eteroatomo.

Struttura della verifica di profitto :
Scritta, Orale

CHIMICA SUPRAMOLECOLARE

(Titolare: Prof. TONIOLO CLAUDIO)

Periodo: *I anno, 2 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof. TONIOLO CLAUDIO (PO) - Presidente*
Prof. FORMAGGIO FERNANDO (PO) - Membro
Dott. MORETTO ALESSANDRO (RuC) - Membro

Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Prerequisiti :
Lo studente deve aver superato gli esami di Chimica Organica I, II e III.
Obiettivi formativi :
Il corso è inteso a completare le conoscenze di base della Chimica Organica che lo studente ha acquisito con la laurea di primo livello e che sono ritenute indispensabili per il percorso di laurea magistrale in Chimica.
Contenuto dell'attivita' formativa :
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.

Struttura della verifica di profitto :
Orale
Testi di riferimento :
H. Dugas, "Bioorganic Chemistry" (third edition), Springer Verlag, 1996.
Ausili didattici :
appunti di lezione

CHIMICA SUPRAMOLECOLARE DI SUPERFICIE

(Titolare: Prof. SAMBI MAURO)

Periodo: *I anno, 2 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof. SAMBI MAURO (St) - Presidente*
Prof. CASARIN MAURIZIO (PO) - Membro

Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Contenuto dell'attivita' formativa :
Il corso verrà tenuto in lingua inglese.

Il corso si propone di fornire le nozioni fondamentali inerenti alla produzione di aggregati molecolari funzionali supportati su superfici inorganiche. Saranno introdotte le necessarie nozioni di chimica e struttura delle superfici e verranno considerati i fattori termodinamici e cinetici che possono favorire od ostacolare l'auto-organizzazione atomica e molecolare di superficie. Si considereranno quindi le principali classi di strutture molecolari self-assembled supportate, i relativi metodi di preparazione e le principali tecniche di caratterizzazione morfologica, strutturale, elettronica e funzionale degli aggregati prodotti.
Struttura della verifica di profitto :
Orale
Testi di riferimento :
comunicati dal docente all'inizio del corso.

CHIMICA TEORICA

(Titolare: Prof. POLIMENO ANTONINO)

Periodo: *I anno, 2 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof. POLIMENO ANTONINO (St) - Presidente*
Prof. MORO GIORGIO (PO) - Membro

Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Prerequisiti :
nozioni di base dei corsi di chimica, fisica e matematica.
Propedeuticita' :
nessuna.
Obiettivi formativi :
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. L'utilizzazione delle diverse metodologie sarà esemplificata in alcuni casi mediante esercitazioni al calcolatore.
Contenuto dell'attivita' formativa :
Il corso verrà tenuto in lingua inglese.

1. Esposizione della meccanica classica non relativistica
- principio di Hamilton, equazioni del moto del corpo rigido, equazioni di Hamilton, trasformazioni canoniche, formulazione di Poisson
- metodi classici esatti ed approssimati per lo studio di dinamiche molecolari roto-traslazionali in fasi condensate
2. Esposizione della meccanica quantistica non relativistica
- fondamenti della meccanica quantistica e relazione con la meccanica classica
- teoria dei momenti angolari

- teoria dei gruppi
- metodi tradizionali di calcolo di strutture elettroniche (Hartree-Fock), metodi del funzionale densità, metodi multiconfigurazionali e multireference
3. Teoria dei responsi lineari
4. Descrizione probabilistica dei moti molecolari e funzioni di correlazione

Struttura della verifica di profitto :
Orale
Descrizione verifica profitto :
esame orale, con la possibilità di concordare la discussione di un problema specifico con il docente e di discutere un breve elaborato.
Testi di riferimento :
dispense ed appunti di lezione.

CONTROLLO E QUALITà IN CHIMICA ANALITICA

(Titolare: Prof. MAGNO FRANCO)

Periodo: *I anno, 2 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof. MAGNO FRANCO (PrCr) - Presidente*

Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Prerequisiti :
Conoscenze di chimica Analitica
Propedeuticita' :
Chimica Anallitica I e II
Obiettivi formativi :
Fornire al discente gli elementi matematico-statistico per la valutazione della credibilità dei dati analitici.
Contenuto dell'attivita' formativa :
Linee guida per la validazione dei metodi analitici:specificità o selettività, linearità di calibrazione, ripetibilità, riproducilità, precisione, accuratezza, limiti di rivelabilità e di quantificazione, ricupero, prova di applicabilità.
Tipi di distribuzione: normale, di Student, chi-square, F. Intervalli fiduciari, test statistici, ANOVA.
Calibrazione lineare e non lineare. Dati omoscedastici ed eteroscedasticiti. Regressione non pesata e pesata. Giusticazione dell'uso dei pesi. Limite di decisione, di rivelabilità, di quantificazione. Fondamenti statistici delle diverse procedure. Falsi positivi e falsi negativi. Confronto tra le procedure. Calibrazione multivariata.
Ottimizzazione. Disegno sperimentale ed esperimento fattoriale. Esperimento evoluzionario, metodo del Simplex.
Esame ed approfondimento della normativa nazionale ed europea.
Struttura della verifica di profitto :
Orale
Testi di riferimento :
P.C.Meier R.E. Zund, " Statistical Methods in Analytical Chemistry", J. Wiley and Sons, 2000.
Y.N. Miller, J.C. Miller, "Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry", Prentice Hall, 2000.
S.N.Deming, S.L. Morgan, " Experimental Design: a Chemiometric Approach", Elsevier, 1987..
Pubblicazioni degli Enti normativi.

CRISTALLOGRAFIA E BIO-CRISTALLOGRAFIA

(Titolare: Prof. ZANOTTI GIUSEPPE)

Periodo: *I anno, 2 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof. ZANOTTI GIUSEPPE (PO) - Presidente*
Prof. BATTISTUTTA ROBERTO (PaC) - Membro
Prof.ssa SPADON PAOLA (PaC) - Membro

Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Prerequisiti :
Nozioni di base dei corsi di fisica e matematica.
Obiettivi formativi :
Il corso descrive il metodo di determinazione della struttura di molecole e macromolecole mediante diffrazione dei raggi X. E' suddiviso in due parti. Nella prima parte vengono descritte le proprietà geometriche dei cristalli e introdotti i principi della diffrazione; nella seconda parte viene trattata la tecnica di caratterizzazione strutturale, applicata sia alle piccole molecole, organiche ed inorganiche, che alle macromolecole biologiche. Alla fine verrà svolta una breve esercitazione al calcolatore.
Contenuto dell'attivita' formativa :
1. Premesse matematiche. Trasformate di Fourier, convoluzione, teorema della convoluzione.
2. Simmetrie nei cristalli (operatori, gruppi puntuali, classi di Laue, reticoli di Bravais, gruppi spaziali). Reticoli reale e reciproco.
3. Tecniche di cristallizzazione. Cristallizzazione di proteine globulari.
4. I raggi X. Produzione, proprietà.

5. Diffusione dei raggi X. Principi generali.
6. Scattering di atomi, di una molecola, di una cella.
7. Diffrazione di un cristallo. Il fattore di struttura. Trasformata di Fourier di una densità elettronica.
8. Legge di Bragg. Il concetto di risoluzione.
9. Metodi di misura dei dati di diffrazione.
10. Il problema della fase.
11. Metodi per la risoluzione del problema della fase. La funzione di Patterson. Cenni ai metodi diretti.
12. Peculiarità del problema della fase per i cristalli di macromolecole.
13. Metodi MIR, MR e MAD.
14. Affinamento della struttura.
15. Cenni alla diffrazione di neutroni e di elettroni.
16. Utilizzo e significato dei dati strutturali.
Struttura della verifica di profitto :
Orale
Testi di riferimento :
Giacovazzo, Monaco, Artioli, Viterbo, Ferraris, Gilli, Zanotti, Catti Fundamentals of Crystallography, 2nd ed., Oxford University Press, Oxford 2002
Ausili didattici :
Dispense di lezione fornite dal docente

ELETTROCHIMICA

(Titolare: Prof. MARAN FLAVIO)

Periodo: *II anno, 1 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof. MARAN FLAVIO (PO) - Presidente*
Dott.ssa ANTONELLO SABRINA (RuC) - Membro

Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Prerequisiti :
Conoscenze di base di Chimica Fisica I e II, Chimica Organica e Chimica Inorganica.
Obiettivi formativi :
Studio delle reazioni elettrochimiche, delle reazioni di trasferimento elettronico, e delle microscopie a scansione di sonda.
Contenuto dell'attivita' formativa :
Proprietà generali dei sistemi elettrochimici. Cinetica elettrodica. Trasferimento elettronico eterogeneo. Trasporto di massa. Effetto di reazioni chimiche associate al trasferimento elettronico. Competizioni cinetica. Meccanismi di attivazione. Relazione tra velocità ed energia libera dei processi di trasferimento elettronico. Teoria di Marcus e sviluppi successivi. Effetto della distanza sui trasferimenti elettronici. Trasferimento elettronico dissociativo. Trasferimento elettronico in sistemi biologici. Metodi sperimentali più diffusi per lo studio delle cinetiche elettrodiche e dei trasferimenti elettronici. Tecniche di microscopia a scansione di sonda, con particolare riguardo ad applicazioni elettrochimiche. Atomic force microscopy (AFM). Scanning tunneling microscopy (STM). Scanning electrochemical microscopy (SECM).
Struttura della verifica di profitto :
Scritta
Testi di riferimento :
Appunti di lezione e “Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications”, di A. J. Bard e L. R. Faulkner, 2a edizione, Wiley, 2001.
Ausili didattici :
Materiale fornito dal docente.

IL BREVETTO IN CHIMICA

(Titolare: Dott. LEGANZA ALESSANDRO)

Periodo: *II anno, 1 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto:
Tipologie didattiche: *12A; 1,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Prerequisiti :
Cultura chimica di base.
Obiettivi formativi :
Il corso ha lo scopo di fornire ai partecipanti una preparazione di base sui diritti di Proprietà Intellettuale ed in particolare sui brevetti in ambito chimico. I partecipanti acquisiranno le conoscenze di base necessarie per poter leggere e valutare brevetti e domande di brevetto; saranno in grado di capire quali invenzioni chimiche sono brevettabili e quali sono i problemi di natura brevettuale che sottostanno alla ricerca e sviluppo ed alla produzione in campo chimico. Diventerà inoltre patrimonio comune un linguaggio specialistico necessario per favorire la comunicazione in questa materia.
Metodi didattici :
Lezioni in aula con proiezione di presentazioni PowerPoint.
Contenuto dell'attivita' formativa :
La proprietà intellettuale. Il brevetto chimico. Le invenzioni dei dipendenti delle Università. I brevetti delle Università.

I requisiti di brevettabilità. Le formule generali. La contraffazione.
Le convenzioni Internazionali: la Convenzione di Parigi, Patent Cooperation Treaty (PCT), European Patent Convention (EPC), Community Patent Convention (CPC), Accordi TRIPs, European Innovation Scoreboard (EIS). Deposito secondo la via nazionale, regionale o internazionale.
La struttura di una domanda di brevetto. Storia della legge italiana.
Domande d brevetto e brevetti concessi. Il brevetto italiano, EP, US, domande PCT.
Brevetti Chimici. Brevetti Farmaceutici. Durata dei brevetti. SPC, CCP, PTE.
Il reperimento di informazioni brevettuali: i database commerciali, i siti internet europei, i siti internet americani.
Tipologie di ricerche brevettuali. Applicazioni e strategie IP.

Struttura della verifica di profitto :
Scritta
Descrizione verifica profitto :
Esame scritto
Testi di riferimento :
Dispense ed appunti di lezione, poiché non esiste un unico testo che comprenda la varietà dei temi trattati.
Ausili didattici :
Testi di consultazione:
Luigi Carlo Ubertazzi, "Il Codice della Proprietà Industriale", CEDAM, 2009.

MAGNETOCHIMICA

(Titolare: da definire)

Periodo: *II anno, 1 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto:
Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scineze Chimiche*

Struttura della verifica di profitto :
Da definire

MECCANISMI DI REAZIONE IN CHIMICA INORGANICA

(Titolare: Prof. BASATO MARINO)

Periodo: *II anno, 1 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof. BASATO MARINO (PO) - Presidente*
Dott.ssa TUBARO CRISTINA (RuC) - Membro

Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Prerequisiti :
Sono considerati preliminari i corsi di Chimica Inorganica.
Obiettivi formativi :
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 ossidoriduzione, 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.
Contenuto dell'attivita' formativa :
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. Ossidoriduzioni 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 (oxosintesi). Reazioni di carbonilazione: sintesi di acido acetico da metanolo e ossido di carbonio. Reazione di Heck.
Struttura della verifica di profitto :
Orale
Testi di riferimento :
R. G. Wilkins, "Kinetics and Mechanisms of Reaction of Transition Metal Complexes", 2nd Ed., VCH, Weinheim, 1991.
R. H. Crabtree, "The Organometallíc Chemistry of the Transition Metals", 5th Ed., Wiley, New York, 2009.

Ausili didattici :

Appunti di lezione forniti agli studenti.

MECCANISMI DI REAZIONE IN CHIMICA ORGANICA

(Titolare: Dott.ssa BONCHIO MARCELLA)

Periodo: *II anno, 1 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Dott.ssa BONCHIO MARCELLA (PrCr) - Presidente*

Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Prerequisiti :
Chimica Organica I, II, e III. Nozioni di base di termodinamica.
Obiettivi formativi :
Fornire gli strumenti concettuali per lo studio dei meccanismi delle reazioni organiche.
Contenuto dell'attivita' formativa :
1. Studio dei meccanismi di reazione
Richiami di termodinamica e cinetica. Leggi cinetiche differenziali e integrate. Relazione tra cinetica e meccanismo. Eq. di Arrhenius, teoria dello stato di transizione, eq. di Eyring. Superfici di energia potenziale e coordinata di reazione. Diagrammi di reazione. Superfici di energia potenziale. Postulato di Hammond. Principio di reversibilità microscopica. Principio di reattività/selettività. Principio di Curtin-Hammett.
2. Effetto isotopico
Effetto isotopico cinetico e di equilibrio: primario e secondario, esempi e teoria. Informazioni meccanicistiche.
3. Correlazioni lineari di energia libera
Ricapitolazione su analisi di correlazione ed equazione di Hammett. Analisi di correlazione per la cinetica. Scala sigma+/–, eq. di Yukawa-Tsuno. Correlazioni multiparametriche, eq. di Taft-Ingold. Cenni QSAR.
4. Effetto solvente
Effetto solvente su equilibri e velocita' di reazione, meccanismo e stereochimica. Struttura dei liquidi. Interazioni non covalenti. Classificazione dei solventi. Solventi non convenzionali: liquidi ionici, fluidi supercritici. Regole di Hughes-Ingold. Metodi empirici: Grunwald-Winstein, Kosower, Reichardt. Scala di Abraham-Kamlet-Taft. Metodo unificato. Informazioni meccanicistiche dall'effetto solvente. Paragone tra reazioni in fase gas e soluzione. Cenni su idratazione idrofobica.
5. Acidi e basi
Definizioni, misura. Effetto livellante del solvente. Effetti strutturali e solvente sul pK. Velocità del trasferimento protonico, acidi al carbonio. Misura dell'acidità di acidi deboli. Equilibri acido-base in fase gas. Basicità in fase gas vs. soluzione. Basicità dei composti organici. Funzione di acidità di Hammett e sue limitazioni. Eq. di Bunnett-Olsen. Excess Acidity. Il parametro m. Effetti sostituente sulla basicità.*
6. Catalisi acido-base
Cinetica dei processi catalizzati e non. Catalisi elettrofila. Catalisi acida e basica, specifica e generale: implicazioni meccanicistiche. Catalisi nucleofila. Effetti isotopici in catalisi acida e basica. Reazioni acido-catalizzate in acidi concentrati.
Struttura della verifica di profitto :
Scritta
Descrizione verifica profitto :
Scritta con domande a risposta multipla.
Testi di riferimento :
F. A. Carey, R. J. Sundberg: Advanced Organic Chemistry, Plenum Publ. Co., IV ed., 2000.
H. Maskill: Structure and Reactivity in Organic Chemistry, Oxford University Press, 1999.
N. Isaacs: Physical Organic Chemistry, Longman Scientific & Technical, II ed., 1995.
Ausili didattici :
Dispense reperibili in rete alla pagina web del corso (http://www.chimica.unipd.it/alessandro.bagno/pubblica/mec.html)

METODI FISICI IN CHIMICA ORGANICA

(Titolare: Prof.ssa PARADISI CRISTINA) - Mutuato da: Laurea magistrale in Chimica Industriale

Periodo: *II anno, 1 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto:
Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Obiettivi formativi :
Fornire agli studenti le conoscenze necessarie per l'identificazione di composti organici ragionevolmente complessi attraverso analisi degli spettri NMR (1H e 13C), IR e di massa. Introdurre cenni sulle procedure analitiche più avanzate di NMR e spettrometria di massa.
Contenuto dell'attivita' formativa :
- Risonanza Magnetica Nucleare
Proprietà magnetiche dei nuclei. Principi operativi e strumentazione. Tecnica ad impulsi con trasformata di Fourier. Parametri di acquisizione. Rilassamento. Spostamento chimico. Accoppiamento scalare. Equivalenza chimica ed equivalenza magnetica. Spettri del primo ordine e di ordine superiore. Diastereotopismo. NMR dinamico. Doppia risonanza. Reagenti di shift. Determinazione di eccesso enantiomerico. Spettroscopia 13C-NMR. Effetto Nucleare Overhauser. Cenni su tecniche di spettroscopia NMR di correlazione.
- Spettrometria di massa
Principi operativi e cenni sulla strumentazione. Intervallo di massa e risoluzione. Ionizzazione elettronica e frammentazione:

distribuzione dell'energia interna e velocità di reazione. Picchi isotopici. Frammentazioni caratteristiche di composti organici in funzione dei gruppi funzionali. Ionizzazione chimica. Analisi di molecole ad alto peso molecolare e/o termolabili e nuovi metodi di ionizzazione con fasci laser (MALDI) e a pressione atmosferica (API: electrospray e APCI). Spettrometria di massa tandem (MS/MS e MSn). Accoppiamenti GC/MS ed HPLC/MS.
- Spettroscopia infrarossa
Rassegna delle principali bande caratteristiche dei gruppi funzionali di composti organici.
Struttura della verifica di profitto :
Scritta
Testi di riferimento :
R. M. Silverstein, F. X. Webster, "Identificazione Spettroscopica di Composti Organici", 2a edizione, Casa Editrice Ambrosiana, 2006.
J. R. Chapman, "Practical Organic Mass Spectrometry", Wiley, 1995.
H. Friebolin, "Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy", VCH, 1991.
H. Günther, "NMR Spectroscopy", 2nd ed., John Wiley & Sons, 1994.
Ausili didattici :
Dispense ed appunti di lezione.

MODELLI E METODI DI INDAGINE PER SISTEMI NANOSTRUTTURATI

(Titolare: da definire)

Periodo: *II anno, 1 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto:
Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Contenuto dell'attivita' formativa :
Richiamo della descrizione delle proprietà periodiche di sistemi condensati in particolar modo per quanto riguarda gli stati elettronici.
Equazioni fondamentali per descrivere il moto degli elettroni e la propagazione della luce nella materia.
Confinamento di elettroni e fotoni nella materia. Densità degli stati per sistemi confinati in una o più dimensioni.
Quantum dots di semiconduttori e conseguenze per le proprietà ottiche ed elettroniche degli elettroni confinati in tali sistemi.
Confinamento di elettroni in particelle metalliche e proprietà di assorbimento plasmonico delle nanostrutture. Confinamento dei fotoni: cristalli fotonici e nuove proprietà ottiche di questi sistemi nanostrutturati.
Proprietà di nanostrutture a base di carbonio: descrizione degli stati elettronici di nanotubi di carbonio e delle loro proprietà ottiche e di conduzione elettrica.
Introduzione alle tecniche per la caratterizzazione di sistemi nanostrutturati. Microscopie elettroniche (TEM e SEM). Microscopie a sonda (SPM come AFM e microscopie ad esso collegate) (queste tecniche saranno introdotte da esperti del campo con attività seminariali specifiche e con la possibilità di un'attività di esercitazioni sugli strumenti con visite nei laboratori di ricerca).
Struttura della verifica di profitto :
Da definire

PRINCIPI E APPLICAZIONI DELLA CHIMICA METALLO-ORGANICA

(Titolare: da definire) *Insegnamento non attivato per l'a.a 2010/2011*

Periodo: *II anno, 1 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof. BIFFIS ANDREA (Pa) - Presidente*

Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Prerequisiti :
Cultura chimica di base impartita nella Laurea di Chimica o di Chimica Industriale.
Obiettivi formativi :
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 finalizzato alla sintesi organica.
Contenuto dell'attivita' formativa :
Introduzione.
I composti metallorganici: definizione. Aspetti storici. Formalismi, definizioni e nomenclatura. I composti metallorganici nella tavola periodica: tendenze.
Composti organometallici dei gruppi principali.
Verranno illustrate le metodologie preparative, le proprietà e le applicazioni dei più importanti composti metallorganici dei diversi gruppi principali e del gruppo 12.
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 s metallo-carbonio, metallocarbonili, metallocarbeni, metalloolefine, metalloareni, composti dienilici ed allilici.

Struttura della verifica di profitto :
Orale
Testi di riferimento :
Appunti di lezione;

C. Elschenbroich, "Organometallics", 3rd ed., Wiley-VCH, Weinheim 2006.

Ausili didattici :
Testi di consultazione (disponibili presso la Biblioteca del Dipartimento di Scienze Chimiche):
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;
F.A. Cotton, G. Wilkinson, C. A. Murillo, M. Bochmann, "Advanced Inorganic Chemistry", 6th ed., Wiley, New York 1999.

PROCESSI CHIMICI ECO-COMPATIBILI

(Titolare: da definire) Insegnamento non attivato per l'a.a 2010/2011

Periodo: *II anno, 1 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto:
Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Prerequisiti :
Cultura chimica di base impartita nella Laurea Triennale di Chimica o di Chimica Industriale
Obiettivi formativi :
Il corso è inteso a fornire le linee guida per lo sviluppo di processi chimici che salvaguardino la salute dell'uomo e dell'ambiente.
Contenuto dell'attivita' formativa :
Alcuni cenni su fatti d'inquinamento ambientale verificatisi nel mondo e sulle normative in tema di prevenzione da essi originati. Come affrontare il problema dell'inquinamento chimico: la strategia di base della "Chimica Verde" asserisce che è meglio prevenire la formazione dei rifiuti chimici piuttosto che adoperarsi per renderli innocui. Enunciazione dei 12 principi della Chimica Verde secondo P.T. Anastas. Strumenti della Chimica Verde: Materiali di partenza alternativi; Reagenti alternativi; Solventi alternativi; Prodotti alternativi; Analisi di processo in tempo reale unita alla capacità di variare le condizioni di reazione a seconda del responso delle analisi. Catalizzatori alternativi. Valutazione degli effetti di un prodotto chimico o di un processo sulla salute dell'uomo e dell'ambiente. Valutazione dei materiali di partenza necessari per un processo chimico "Verde". Valutazione del tipo di reazione chimica coinvolta in processo chimico "Verde". Valutazione dei metodi adottati per la progettazione di composti chimici più sicuri. Esempi di "Chimica Verde": Materiali di partenza "Verdi": Polisaccaridi; prodotti chimici derivanti dal glucosio; Conversione di biomassa in prodotti chimici. Esempi di "Reazioni Chimiche Verdi": Atom economy e catalisi omogenea. Sintesi di ammine aromatiche a partire da composti non alogenati. Un'alternativa verde alla sintesi di Strecker del DSIDA. Esempi di "Reagenti Verdi": Sintesi di isocianati che non coinvolgono fosgene. Metilazioni selettive con dimetilcarbonato. Complessi di metalli di transizione "Verdi" come catalizzatori di ossidazione. Esempi di solventi e condizioni di reazione "Verdi": Fluidi supercritici; Reazioni chimiche in acqua; Solventi immobilizzati; Reazioni fotochimiche. Esempi di prodotti chimici "Verdi": Progettazione di nitrili intrinsecamente meno tossici di quelli tradizionali; Sviluppo di nuovi composti antiincrostazione in sostituzione degli organostagno; Sviluppo di nuovi insetticidi (Rhom and Haas CONFIRM(tm)) basati su nuovi meccanismi di azione. Il poliaspartato termico (TPA) come sostituto biodegradabile dell'acido poliacrilico (PAC). Nuovi sistemi per lo sviluppo di negativi fotografici. Prospettive future nella "Chimica Verde": Nuovi reagenti e catalizzatori per le reazioni di ossidazione; Reagenti biomimetici e multifunzionali. Chimica combinatoriale verde. Reazioni effettuate in assenza di solvente. Derivatizzazione non-covalente di composti chimici.
Struttura della verifica di profitto :
Da definire
Descrizione verifica profitto :
Da concordarsi con gli studenti.
Testi di riferimento :
Green Chemistry "Theory and Practice", Paul T. Anastas, John C. Warner

PROPRIETà OTTICHE DI SISTEMI MOLECOLARI

(Titolare: Prof.ssa FERRANTE CAMILLA)

Periodo: *I anno, 2 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof.ssa FERRANTE CAMILLA (PaC) - Presidente*
Dott. SIGNORINI RAFFAELLA (RuC) - Membro

Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Prerequisiti :
Buona conoscenza degli argomenti trattati nei Corsi di Chimica organica e di Chimica fisica.
Obiettivi formativi :
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 processi fotochimici.
Contenuto dell'attivita' formativa :
Descrizione macroscopica dell'interazione lineare tra radiazione elettromagnetica e materia: coefficienti di assorbimento ed indice di rifrazione.
Descrizione molecolare dell'interazione tra radiazione elettromagnetica e materia: teoria delle perturbazioni al primo ordine e funzioni

responso lineari nel dominio dei tempi e delle frequenze.
Proprietà di simmetria delle molecole ed uso della teoria dei gruppi in spettroscopia.
Transizioni vibrazionali molecolari: spettroscopia di assorbimento e di scattering Raman
Transizioni elettroniche e vibroelettroniche: spettroscopia di assorbimento ed emissione di luminescenza.
Spettroscopia risolta nel dominio dei tempi per lo studio della dinamica e della fotofisica di sistemi molecolari: tempi di vita di stato eccitato, processi di trasferimento di energia e di carica. Effetto Solvente.
Descrizione di processi fotochimici ed alcuni esempi di reazioni fotochimche.
Cenni di spettroscopia ottica non lineare nel dominio dei tempi e delle frequenze.

Struttura della verifica di profitto :
Orale
Testi di riferimento :
Da concordare con il docente.

PROVA FINALE

(Titolare: da definire)

Periodo: *II anno, 2 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto:
Tipologie didattiche: *; 47,00 CFU*

Struttura della verifica di profitto :
Scritta, Orale

SINTESI E REATTIVITà INORGANICA

(Titolare: Prof. PANDOLFO LUCIANO) - Mutuato da: Laurea magistrale in Chimica Industriale

Periodo: *I anno, 2 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof. PANDOLFO LUCIANO (PaC) - Presidente*
Prof. CASARIN MAURIZIO (PO) - Membro

Tipologie didattiche: *24A+48L; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche.*

Prerequisiti :
Conoscenze di base di chimica inorganica, organica e di coordinazione.
Obiettivi formativi :
Il corso verte prevalentemente sullo studio delle interazioni che portano alla formazione di Polimeri di Coordinazione (CP), sistemi ordinati infinitamente estesi, costituiti da specie metalliche e leganti organici polidentati, assemblati attraverso interazioni molecolari e/o supramolecolari.
Metodi didattici :
Lezioni frontali e esercitazioni di laboratorio.
Contenuto dell'attivita' formativa :
Durante le lezioni frontali verranno presentati e discussi i principi alla base della sintesi e caratterizzazione di diversi polimeri di coordinazione (CP), sistemi per i quali si stanno sviluppando ipotesi di utilizzo in alcuni settori tecnologici avanzati quali immagazzinamento di gas, riconoscimento molecolare, catalisi, etc..
Nel corso delle attività di laboratorio saranno effettuate le sintesi e caratterizzazioni di alcuni di tali sistemi ibridi (organici-inorganici) molecolari e supramolecolari. In particolare, si prevede la sintesi di sistemi a base di ioni Cu(II) connessi attraverso leganti polidentati quali anioni carbossilato e sistemi azotati, e/o interazioni "deboli" (H-bonds, pi-stacking) a formare CP o network supramolecolari, nonché la loro caratterizzazione attraverso comuni tecniche analitiche e spettroscopiche e misure di suscettività magnetica. Verrà inoltre utilizzato specifico software grafico per la determinazione delle connessioni molecolari e supramolecolari che portano alla formazione di CP e altri network supramolecolari.
Struttura della verifica di profitto :
Orale
Descrizione verifica profitto :
Svolgimento di una prova orale con discussione delle relazioni di laboratorio.
Testi di riferimento :
J.W. Steed, J. L. Atwood "Supramolecular Chemistry", 2000, Wiley.

SINTESI E REATTIVITà ORGANICA

(Titolare: Prof. CAROFIGLIO TOMMASO)

Periodo: *I anno, 2 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof. CAROFIGLIO TOMMASO (Pa) - Presidente*

Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Prerequisiti :
Chimica Organica IV.
Obiettivi formativi :
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.
Contenuto dell'attivita' formativa :
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.
Struttura della verifica di profitto :
Scritta
Testi di riferimento :
Articoli scientifici forniti dal docente.
Ausili didattici :
Materiale fornito a lezione.

SPETTROSCOPIE MAGNETICHE

(Titolare: Prof.ssa MANIERO ANNA LISA)

Periodo: *I anno, 2 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof.ssa MANIERO ANNA LISA (PaC) - Presidente*
Prof. TOFFOLETTI ANTONIO (PaC) - Membro
Dott. FRANCO LORENZO (RuC) - Membro

Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Obiettivi formativi :
Il corso si propone di familiarizzare lo studente con le problematiche sperimentali ed interpretative 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.
Contenuto dell'attivita' formativa :
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. Esperimento di risonanza magnetica. Hamiltoniano di spin. Interazione Zeeman. Interazioni magnetiche di elettroni e nuclei. Interazione di quadrupolo. Risonanza di spin elettronico e nucleare di sistemi a spin 1/2 e a spin 1. Rilassamenti di spin. Equazioni di Bloch. Matrice densità. Tecniche impulsate di risonanza magnetica (FID, eco di spin, ….).
NMR: tecniche di doppia risonanza e bidimensionali. NMR di stato solido e tecniche di rilassometria NMR.
Tecniche avanzate di spettroscopia EPR: ENDOR, ODMR, EPR risolto nel tempo, EPR ad alto campo-alta frequenza, cenni di EPR impulsato.
Applicazioni delle spettroscopie magnetiche allo studio di liquidi, solidi, solidi orientati in chimica organica, in scienza dei materiali e in biologia.

Struttura della verifica di profitto :
Orale
Testi di riferimento :
-J. A. Weil, J. R. Bolton, and J. E. Wertz, Electron Paramagnetic Resonance: Elementary Theory and Practical Applications. Wiley-Interscience (2007).
-H. Günther, NMR Spectroscopy: Basic Principles, Concepts, and Applications in Chemistry, 2nd Edition. Wiley (2005).
Ausili didattici :
-Dispense di lezione.

STRUTTURA E DINAMICA DI PROTEINE

(Titolare: Prof. MAMMI STEFANO)

Periodo: *II anno, 1 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof. MAMMI STEFANO (PO) - Presidente*
Dott. BELLANDA MASSIMO (RuC) - Membro
Prof.ssa SCHIEVANO ELISABETTA (RuC) - Membro

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

Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Prerequisiti :
Biochimica, conoscenze di base di Chimica Fisica. Utile il corso di Metodi Fisici in Chimica Organica.
Obiettivi formativi :
Questo insegnamento si prefigge di illustrare la determinazione della struttura in soluzione di peptidi e proteine mediante l'uso della spettroscopia NMR. Verranno descritti gli esperimenti fondamentali per la raccolta dei dati necessari e l'utilizzo di questi ultimi per arrivare allo scopo finale. Saranno anche trattati i metodi di calcolo 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.
Contenuto dell'attivita' formativa :
1. Richiami ai principi di base dell\'NMR: chemical shift, accoppiamento scalare.
2. Rilassamenti, accoppiamento dipolare, effetto nucleare Overhauser.
3. Aspetti pratici: strumentazione, acquisizione e trattamento del FID.
4. Il formalismo degli operatori prodotto. Introduzione alla spettroscopia NMR bidimensionale. Concetto di coerenza e trasferimenti di coerenza.
5. Esperimenti 2D omonucleari: COSY e varianti, TOCSY, NOESY, ROESY.
6. Utilizzo dei parametri NMR per la risoluzione della struttura di peptidi e proteine. Pattern caratteristici di particolari strutture secondarie.
7. Metodi di calcolo: distance geometry, molecular dynamics.
8. Soppressione del solvente. Impulsi a gradiente.
9. Impulsi a gradiente per la selezione di coerenze.
10. Spettroscopia di correlazione eteronucleare inversa.
11. Esperimenti 3D omonucleari ed eteronucleari.
12. Misure di rilassamento e dinamica molecolare.
13. Interazioni proteina-proteina.
14. Interazioni proteina-ligando.
15. Produzione di proteine marcate.
16. Sistemi complessi: TROSY per proteine grandi; NMR di cellule intere.
17. NMR in sistemi orientati: Residual Dipolar Couplings.
18. Solid State NMR di proteine.

Struttura della verifica di profitto :
Orale
Testi di riferimento :
J. Cavanagh, "Protein NMR spectroscopy: principles and practice", 2nd ed., Elsevier, 2007.
J. Keeler, "Understanding NMR Spectroscopy", 2nd ed., John Wiley & Sons, 2010.
T. D. W. Claridge, "High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry", Pergamon Press, 1999.
H. Günther, "NMR Spectroscopy", 2nd ed., John Wiley & Sons, 1995.
J. K. M. Sanders and B. K. Hunter, "Modern NMR Spectroscopy", 2nd ed., Oxford University Press, 1994.
H. Friebolin, "Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy", VCH, 1991.
R. M. Silverstein and F. X. Webster, "Identificazione Spettroscopica di Composti Organici", Casa Editrice Ambrosiana, 1999.
A. E. Derome, "Modern NMR Techniques for Chemistry Research", Pergamon Press, 1987.
Ausili didattici :
http://www-keeler.ch.cam.ac.uk/lectures/index.html
http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr
http://www.chem.queensu.ca/FACILITIES/NMR/nmr/webcourse
Parte del materiale verrà fornito a lezione.

TECNOLOGIE ANALITICHE

(Titolare: da definire) *Insegnamento non attivato per l'a.a 2010/2011*

Periodo: *I anno, 2 semestre*
Indirizzo formativo: *Corsi comuni*
Commissione di profitto: *Prof. MARTON DANIELE (PaC) - Presidente*
Dott.ssa FAVARO GABRIELLA (RuC) - Membro

Tipologie didattiche: *48A; 6,00 CFU*
Sede dell'insegnamento : *Dipartimento di Scienze Chimiche*

Prerequisiti :
Buona conoscenza dei concetti fondamentali relativi agli equilibri chimici in soluzione e dei principi informatori delle tecniche strumentali usate in Chimica Analitica
Obiettivi formativi :
Obiettivi formativi :
Il corso si propone di fornire agli studenti una panoramica sulle metodiche analitiche concernenti le tecniche di campionamento e di pretrattamento dei campioni stessi. Questo stadio è di particolare rilevanza per il conseguimento di dati accurati nell'analisi di campioni reali. Una seconda parte del corso fornisce informazioni sulle tecniche analitiche strumentali basate sull'utilizzo di sistemi interfacciati.
Contenuto dell'attivita' formativa :
Tecniche di campionamento, pretrattamento e analisi mediante: estrazione in fase solida (Solid-Phase Extraction), microestrazione in fase solida (Solid-Phase Micro Extraction), spazio di testa statico (Static Head Space) e dinamico (Purge and Trap). Tecniche di mineralizzazione e digestione, estrazione con solventi (Accelerated Solvent Extraction). Tecniche strumentali accoppiate: GC/MS e LC/MS.

Struttura della verifica di profitto :
Orale
Testi di riferimento :
H.H. Bauer “Analisi Chimica Strumentale”
J. Paswliszyn: “Solid phase microextraction – Theory and practice” M. Dekker, 2001
B.V Ioffe: “ Head-Space Analysis and Related Methods in Gas Chromatography”, John Wiley & Son’s, 1999
S.A.S. Wercinki: “Solid Phase Microextraction – A practicalGuide”
W.M.A. Niessen: “ Liquid Chromatography-Mass spectrometry”, M. Dekker, 2nd edition, 1999
W.M.A. Niessen: “ Gas Chromatography-Mass spectrometry” M. Dekker, 2001