



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DI PADOVA

SCUOLA DI SCIENZE

Bollettino Notiziario

Anno Accademico 2013/2014

Laurea magistrale in Chimica (Ord. 2013)

Curriculum: Corsi comuni

CHIMICA ANALITICA DEGLI INQUINANTI

(Titolare: Prof. ANDREA TAPPARO) - Mutuato da: Laurea magistrale in Scienze e Tecnologie per l'Ambiente e il Territorio

Periodo: Il anno, 1 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU

Prerequisiti :

Non sono previste propedeuticit . 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 abilita' da acquisire :

In relazione alle principali norme comunitarie e nazionali in materia ambientale, in particolare quelle riguardanti la qualit  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 verte su:

- Introduzione alle problematiche e ai processi ambientali.
- Elementi di legislazione EU e IT.
- Tecniche e Metodologie di analisi di matrici ambientali.

Attivit  di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni d'aula, esemplificazione di alcuni dettagli strumentali, dimostrazioni del funzionamento di alcune strumentazioni.

Contenuti :

Il corso   diviso in due parti. La Prima Parte (32 ore di lezione, 4 C.F.U.) del corso riguarda i principali parametri di qualit  dell'aria e la loro misura:

- Inquinamento atmosferico e la rete di monitoraggio della qualit  dell'aria.
- Gli analizzatori automatici per la misura dell'inquinamento atmosferico.
- Origine, le propriet  e le tecniche di misura del particolato atmosferico.
- 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.

La Seconda Parte (32 ore di lezione, 4 CFU)   dedicata all'inquinamento delle acque:

- Classificazione delle acque e principali fonti di contaminazione.
- Metodologie per la determinazione dei principali parametri chimici.
- Tecniche analitiche strumentali e loro applicazioni nell'analisi delle acque.
- Microinquinanti ambientali: composti organici clorurati, metalli, antiparassitari (Convenzione di Stoccolma) ed inquinanti emergenti.

Fonti, normativa e metodologie di analisi.

Modalit  di esame :

Orale

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 :

C. Baird, M. Cann, Chimica Ambientale, 2a Ed.: Zanichelli, 2006

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Appunti di lezione.

Materiale didattico fornito dal docente o disponibile presso il sito web dei docenti.

CHIMICA ANALITICA E AMBIENTE

(Titolare: Prof. ANDREA TAPPARO) - Mutuato da:

Periodo: I anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU
Sede dell'insegnamento : Dipartimento di Scienze Chimiche

Prerequisiti :

Per la frequenza al corso, basilari risulteranno le conoscenze di Chimica Analitica 1 e 2.

Conoscenze e abilita' 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 Ãˆ diviso in due parti. La Prima Parte (40 ore di lezione, 5 C.F.U.) presenta alcuni fra gli aspetti piÃ¹ significativi della chimica dell'atmosfera e dell'inquinamento atmosferico:

- l'atmosfera, struttura e proprietÃ ;
 - la chimica della stratosfera e la riduzione dello strato di ozono;
 - la chimica della troposfera e l'inquinamento atmosferico;
 - la rete di monitoraggio della qualitÃ dell'aria
- gli analizzatori automatici per la misura dell'inquinamento atmosferico;
- l'origine, le proprietÃ 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) Ãˆ dedicata ai Regolamenti REACH e CLP:

- il Regolamento europeo CE 1907/2006 REACH; la sua applicazione, problematiche e opportunitÃ per il chimico moderno;
- Identificazione delle sostanze chimiche secondo REACH.
- Il regolamento CLP.

ModalitÃ di esame :

Orale

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, 2a Ed. : Zanichelli, 2006

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.

CHIMICA BIO-INORGANICA

(Titolare: Prof.ssa DOLORES FREGONA)

Periodo: I anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU
Sede dell'insegnamento : Dipartimento di Scienze Chimiche

Prerequisiti :

Prerequisiti: Sono molto importanti conoscenze di chimica inorganica.

Conoscenze e abilitÃ 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, nonchÃ 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 radioattivitÃ : nuclidi instabili ed emissioni radioattive, applicazioni in diagnostica e terapia medica.

AttivitÃ 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 e dispersivi e dovrebbero servire solo come eventuale approfondimento degli argomenti trattati in aula.

Contenuti :

a) Principi di chimica di coordinazione correlati alla chimica bioinorganica: aspetti termodinamici e cinetici (Teoria HSAB; effetto chelante e serie di Irving-Williams; velocitÃ 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 $\nu_{\text{M-L}}$. Serie spettrochimica). Energie di idratazione degli ioni metallici lungo la prima serie di transizione. Cinetica: velocitÃ di reazione; complessi a sfera interna e sfera esterna, reazioni di sostituzione in complessi ottaedrici; meccanismi di la e Id, A, D. Reazioni di trasferimento elettronico. Termodinamica ed equilibrio: energia libera, energia di attivazione. Catalisi, catalizzatori biologici. b) Fondamenti di biochimica: proprietÃ delle molecole biologiche amminoacidi, proteine e loro struttura, acidi nucleici. Gruppi donatori per il legame con il metallo. 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. Caratteristiche del ferro (stabilitÃ e solubilitÃ del Fe(II,III); siderofori: idrossammati 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), emereitina ed emocianina. Lo zinco negli esseri viventi: ruolo nei processi enzimatici e nei processi di riconoscimento molecolare (proteine $\hat{a}c\hat{e}zinc\ finger\hat{a}$). Enzimi idrolasi, carbossipeptidasi, fosfatasi alcalina, fosfatasi acida porpurea umana e delle piante. Ciclo di krebs, glicolisi, aconitase, anidrase carbonica. Ruolo del ferro nei processi enzimatici di trasferimento elettronico. Proteine ed enzimi redox, centri redox πd^1 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 reductasi, citocromo c ossidasi, ATP sintetasi. Aspetti fondamentali della biochimica del cobalto (vitamina B12, adenosilcobalammina e metilcobalammina) e del manganese (Mn-SOD, Mn-catalasi e processi di fotosintesi). c)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 :

I. Bertini, H. B. Gray, E. I Stiefel, J. S. Valentine, *Biological Inorganic Chemistry, structure and Reactivity*. Sausalito, California.: Ed. University Science Books,,

J.A. Cowan, *Inorganic Biochemistry, an introduction*. : Wiley-VCH,

M. R. Roat-Malone, *Bioinorganic chemistry: a short course..* : Wiley Interscience,

S. J. Lippard, J. M. Berg, $\hat{a}c\hat{e}Principles of Bioinorganic Chemistry$. 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: Il anno, 1 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU
Sede dell'insegnamento : Dipartimento di Scienze Chimiche

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 per le proprietà biologiche 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 asimmetriche e alla risoluzione dei racemati. Peptidi: classificazione ed esempi di peptidi bioattivi. 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. Problemi nella sintesi peptidica. Modifiche peptidiche e tecniche di ligazione. Chimica combinatoriale applicata alla sintesi di peptidi. Tecniche di bio-coniugazione.

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 :

A.B. Hughes, *Amino Acids, Peptides and Proteins in Organic Chemistry* (6 volumi). : Wiley-VCH, 2009

P. Lloyd-Williams, F. Albericio, *Chemical approaches to the synthesis of peptides and proteins*. : CRC Press LLC, 1997

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

Contenuti :

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.

Testi di riferimento :

CONTENUTO NON PRESENTE

CHIMICA DEI MATERIALI ORGANICI

(Titolare: Prof. ENZO MENNA)

Periodo: I anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
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

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 :

Scritto

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

Prerequisiti :

Concetti base di termodinamica e cinetica chimica

Concetti di base sulla diffusione

Conoscenze e abilità da acquisire :

Descrizione delle proprietà dei solidi e delle loro superfici

Cristallografia in due dimensioni

Colloidi ed interfacce

Visione microscopica dei processi catalitici eterogenei

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Attività di aula e visite ai laboratori

Contenuti :

- Richiami di struttura dei solidi Reticoli e strutture inorganiche di rilevanza in campo catalitico. Concetti di base di cristallografia. Solidi monocristallini, policristallini ed amorfi. Cenni sulla difettualità dei solidi. -Introduzione alle Interfasi Importanza tecnologica delle superfici. Cenni storici sulla Surface Science. Strati sottili. Energia interfacciale e termodinamica delle interfasi. Solidi dispersi e area superficiale. Colloidi e dispersioni. Tensioattivi. -Superfici ideali e superfici reali Cristallografia di superficie: reticolo diretto e reciproco. Rilassamento e ricostruzioni superficiali. Notazioni sulle ricostruzioni di superficie. Metodologie per lo studio strutturale delle superfici: Low Energy Electron Diffraction (LEED). Cristallografia Difetti superficiali. Rugosità e morfologia di superficie. Metodologie per lo studio morfologico delle superfici: Atomic Force Microscopy (AFM). Effetto tunnel e Scanning Tunneling Microscopy (STM). -Interfase solido-vuoto e solido-gas Metodi di produzione ed uso del vuoto in Scienza delle Superfici. Richiami di teoria cinetica dei gas. Sticking coefficient. Calcolo del tempo di vita medio di una superficie pulita. Chemisorbimento e fisisorbimento. Interazioni interadsorbato.

Isoterme di adsorbimento. Desorbimento. Desorbimento termico programmato (TPD). -Interfase solido-solido: Epitassia. Meccanismi di crescita degli strati sottili e processi elementari atomici connessi. Molecular Beam Epitaxy (MBE). Metodologie per la creazione di nanostrutture superficiali: film ultrasottili, nanodots, nanowires. -Metodi spettroscopici per lo studio delle superfici Sensibilità di superficie. Processi di scattering fotone-atomo, elettrone-atomo e ione-atomo. Spettroscopie di fotoelettroni e di ioni. Spettroscopie vibrazionali (IRAS e HREELS). -Reattività delle superfici Mobilità delle specie adsorbite. Cinetica delle reazioni in superficie. Paragone tra reazioni in fase omogenea ed eterogenea. Esame di alcune reazioni superficiali.

Modalità di esame :

orale

Testi di riferimento :

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

G. Granozzi, appunti di lezione. : ,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Dispense e lucidi messi a disposizione degli studenti

CHIMICA FARMACEUTICA

(Titolare: Prof. GIUSEPPE ZAGOTTO) - Mutuato da:

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU

Prerequisiti :

Nessuno

Conoscenze e abilità da acquisire :

Esaminare alcuni degli argomenti fondamentali della chimica farmaceutica, utilizzando anche nozioni di farmacologia e di chimica farmaceutica industriale.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni d'aula.

Contenuti :

Cenni di farmacologia. Farmacocinetica: la concentrazione plasmatica dei farmaci: assorbimento, distribuzione, metabolismo ed eliminazione. Farmacodinamica: Recettore, definizioni e caratteristiche, classi di recettori. La ricerca di un nuovo farmaco: studio dell'interazione farmaco-recettore e relazioni struttura-attività, sintesi in soluzione e su fase solida (parallela e combinatoria), le fasi cliniche e il brevetto. Farmaci antitumorali. Farmaci antibatterici e antivirali. Il sistema cardiovascolare e l'ipertensione. Il dolore: farmaci antiinfiammatori, anestetici locali e farmaci contro il dolore acuto (morfini e derivati). Oltre a questo materiale verrà trattato qualche capitolo della chimica farmaceutica di particolare interesse per gli studenti presenti.

Modalità di esame :

Orale

Criteri di valutazione :

Sarà valutata l'acquisizione delle conoscenze e delle abilità sopra descritte.

Testi di riferimento :

Graham L. Patrick, Introduzione alla Chimica Farmaceutica. : EDISES, 2010

THOMAS L. LEMKE DAVID A. WILLIAMS FOYE, Foye's Principi di Chimica Farmaceutica. Padova: Piccin, 2011

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Testi consigliati e appunti di lezione

CHIMICA FISICA 4

(Titolare: Prof. FLAVIO MARAN)

Periodo: I anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

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

Sede dell'insegnamento : Dipartimento di Scienze Chimiche

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).

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni d'aula, discussioni su argomenti specifici, esercitazioni d'aula e di laboratorio.

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 quantomeccaniche; 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 :

Esame scritto basato su una serie di test intermedi, da sostenere durante il semestre, ed uno finale, da sostenere in corrispondenza del primo appello utile.

Esame orale.

Criteri di valutazione :

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: da definire) Insegnamento non attivato per l'a.a 2013/2014

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

Prerequisiti :

CONTENUTO NON PRESENTE

Conoscenze e abilità da acquisire :

CONTENUTO NON PRESENTE

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

CONTENUTO NON PRESENTE

Contenuti :

CONTENUTO NON PRESENTE

Modalità di esame :

CONTENUTO NON PRESENTE

Criteri di valutazione :

CONTENUTO NON PRESENTE

Testi di riferimento :

CONTENUTO NON PRESENTE

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

CONTENUTO NON PRESENTE

CHIMICA FISICA DEI SISTEMI BIOLOGICI

(Titolare: Prof.ssa DONATELLA CARBONERA)

Periodo: I anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU

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 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.

Modalita' 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. RENATO BOZIO)

Periodo: I anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 40A+10E; 6,00 CFU
Sede dell'insegnamento : Dipartimento di Scienze Chimiche

Contenuti :

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.

Testi di riferimento :

CONTENUTO NON PRESENTE

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

appunti di lezione.

CHIMICA INORGANICA 3

(Titolare: Prof. MAURIZIO CASARIN)

Periodo: I anno, 1 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 56A+36L; 10,00 CFU
Sede dell'insegnamento : Dipartimento di Scienze Chimiche

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 orbitale 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.

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 σ -donatori, π -donatori e π -accettori;
8. Complessi ottaedrici ML₆ di tipo σ ;
9. Complessi ottaedrici ML₆ di tipo π ;
10. Angular Overlap Method (AOM) per il sistema biatomico ML₂; 11. AOM per sistemi del tipo ML_n;
12. Campo debole;
13. Campo forte;
14. Diagrammi di Tanabe-Sugano;
15. Applicazione della spettroscopia elettronica allo studio delle proprietà elettroniche dei complessi dei metalli di transizione;
16. Metodo della simmetria discendente;
17. Legami multipli metallo-legante I (M=L);
18. Legami multipli metallo-legante II (L=M=L);
19. Composti ciclopentadienilici;
20. Complessi caratterizzati dalla presenza di interazioni metallo-metallo;

21. Applicazione della spettroscopia vibrazionale allo studio dei complessi dei metalli di transizione;
22. Accoppiamento spin-orbita, gruppi doppi, campo dei leganti; 23. Suscettività magnetica ed equazione di Van Vleck;
24. Magnetismo nei composti di coordinazione.

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 :

R. L. Carter, *Molecular Symmetry and Group Theory.* ; ,
U. Schubert, N. Häring, *Synthesis of inorganic materials.* ; ,
G. L. Miessler and D. A. Tarr, *Inorganic Chemistry.* ; ,

CHIMICA INORGANICA AVANZATA

(Titolare: Prof. MAURIZIO CASARIN)

Periodo: I anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU
Sede dell'insegnamento : Dipartimento di Scienze Chimiche

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.

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 L^2 , L , L_z , S^2 , S , S_z ; accoppiamento Russell-Saunders; configurazioni elettroniche e stati; stati derivanti dalla configurazione elettronica p^2 , p^3 , d^2 ; Elementi di matrice di operatori mono e bielettronici; integrali Coulombiani e di Scambio; energie dei termini corrispondenti alla configurazione d^2 : $3F$, $3P$, $1G$, $1D$, $1S$; parametri di Slater-Condon per configurazioni del tipo pn (F_0 , F_2) e dn (F_0 , F_2 , F_4); 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 $3d^2$ in un campo cristallino ottaedrico; rimozione della degenerazione orbitale dello stato $3F$ ad opera di un campo cristallino debole di simmetria ottaedrica; funzioni d'onda relative agli stati T_{1g} , T_{2g} , A_{2g} 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 parametri di Slater Condon; stati ed energie derivanti dalla configurazione $(t_{2g})^2$; equivalenza tra elettroni t_{2g} 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

Testi di riferimento :

J. S. Griffith, *The Theory of Transition-Metal Ions.* ; ,
Robert L. Carter, *Molecular Symmetry & Group Theory.* ; ,

CHIMICA ORGANICA 4

(Titolare: Prof.ssa MARCELLA BONCHIO)

Periodo: I anno, 1 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 48A+10E+36L; 10,00 CFU
Sede dell'insegnamento : Dipartimento di Scienze Chimiche

Prerequisiti :

nessuno

Conoscenze e abilità da acquisire :

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. In laboratorio l'attenzione sarà rivolta all'acquisizione di esperienza nel campo delle metodologie sintetiche e analitiche avanzate, applicate alla sintesi organica anche multistadio, alla stereochimica organica, ed alla caratterizzazione dei prodotti. Saranno curati anche gli aspetti relativi alla stesura di una relazione e ad una ricerca bibliografica efficace.

Contenuti :

L'effetto del sostituente nelle reazioni organiche. Definizione delle costanti σ e valutazione del ρ . 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 nitratura 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 Oâ€™Ferrall per lâ€™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 Oâ€™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 dicioesilcarbodiimide oppure ossalilcloruro. Eliminazioni alfa, E-1, E-2, E1cb. Orientazione Saytzeff e Hoffman. Effetto della base. Diagramma di More Oâ€™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. In laboratorio saranno condotte le seguenti esperienze: Studio dell'effetto del sostituente: correlazione di energia libera di Hammett. Reazione multistadio, con formazione di legame carbonio-carbonio mediante catalisi metallica. Metodi per la determinazione dell'eccesso enantiomerico. Ricerca bibliografica.

Modalità di esame :

orale, con valutazione delle relazioni di laboratorio

Testi di riferimento :

F.A. Carey and R.J. Sundberg,, Advanced Organic Chemistry, Part B. : ,

M. B. Smith, J. March,, March's advanced organic chemistry : reactions, mechanisms, and structure. : ,

Ernest L. Eliel, Samuel H. Wilen, Stereochemistry of Organic Compounds. : ,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

materiale fornito a lezione, dispense di laboratorio.

CHIMICA ORGANICA 4 - SDOPPIAMENTO

(Titolare: Prof.ssa MARCELLA BONCHIO) - Mutuato da:

Periodo: I anno, 1 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 48A+10E+36L; 10,00 CFU

Prerequisiti :

nessuno

Contenuti :

Lâ€™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 piâ€™1 stadi. Applicazione del postulato di Hammond. Entalpia di idrogenazione. Effetto della concentrazione dei reagenti sulle reazioni ad uno o piâ€™1 stadi. Ordine di reazione e meccanismo: la nitratura 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 Oâ€™Ferrall per lâ€™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 Oâ€™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 dicioesilcarbodiimide oppure ossalilcloruro. Eliminazioni alfa, E-1, E-2, E1cb. Orientazione Saytzeff e Hoffman. Effetto della base. Diagramma di More Oâ€™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. In laboratorio saranno condotte le seguenti esperienze: Studio dell'effetto del sostituente: correlazione di energia libera di Hammett. Reazione multistadio, con formazione di legame carbonio-carbonio mediante catalisi metallica. Metodi per la determinazione dell'eccesso enantiomerico. Ricerca bibliografica.

Modalità di esame :

orale, con valutazione delle relazioni di laboratorio

Testi di riferimento :

M. B. Smith, J. March,, March's advanced organic chemistry : reactions, mechanisms, and structure. : ,

Ernest L. Eliel, Samuel H. Wilen, Stereochemistry of Organic Compounds. : ,

F.A. Carey and R.J. Sundberg,, Advanced Organic Chemistry, Part B. : ,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

materiale fornito a lezione, dispense di laboratorio.

CHIMICA ORGANICA SUPERIORE

(Titolare: Prof.ssa GIULIA MARINA LICINI)

Periodo: I anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni

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

Prerequisiti:

Frequenza Chimica Organica Avanzata

Conoscenze e abilità da acquisire:

Il corso si propone di fornire allo studente tutti 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 del corso si studiano gli aspetti teorici della stereochimica (simmetria, chiralitàTM, stereogenicitàTM, 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.

Criteri di valutazione:

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

Testi di riferimento:

Patrick J. Walsh, Marisa C. Kozlowski, *Fundamentals of Asymmetric Synthesis*. Sausalito, California, USA: University Science Books, 2009

Eliel and Wilen, *Stereochemistry of Organic Compounds*. : ,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Dispense del docente <http://www.chimica.unipd.it/giulia.licini/pubblica/>.

Articoli e reviews di letteratura

CHIMICA SUPRAMOLECOLARE

(Titolare: Prof. FABRIZIO MANCINI)

Periodo: I anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU
Sede dell'insegnamento: Dipartimento di Scienze Chimiche

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 e nella costruzione di materiali supramolecolari e macchine molecolari.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento:

Il corso è organizzato in 64 ore di lezioni teoriche effettuate con il supporto di diapositive.

Viene sollecitata la massima partecipazione degli studenti con inviti al dibattito e momenti di discussione.

Contenuti:

Chimica organica biomimetica e supramolecolare: Complessi ospite-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 apprendimento.

Criteri di valutazione:

Lo scopo della valutazione è verificare l'acquisizione da parte dello studente delle conoscenze ed abilità descritte in precedenza.

Verrà valutato il rigore scientifico della presentazione, la capacità di sintesi, la correttezza formale, l'acquisizione dei contenuti proposti nel corso e la capacità di utilizzarli per elaborare una discussione organica su un argomento di ricerca.

Testi di riferimento:

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

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

Eventuali indicazioni sui materiali di studio:

Il materiale didattico è costituito principalmente dalle copie delle diapositive messe a disposizione dai docenti, dagli appunti di lezione e da articoli scientifici a carattere di review segnalati dai docenti.

Lo studente puÃ² 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. ANTONINO POLIMENO)

Periodo: I anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU
Sede dell'insegnamento : Dipartimento di Scienze Chimiche

Prerequisiti :

Conoscenze di base di chimica, fisica, matematica

Conoscenze e abilita' da acquisire :

Il corso Ã¨ dedicato all' introduzione ai metodi teorici necessari per descrivere i processi molecolari nelle fasi condensate, assieme alla loro applicazione per lâ€™ interpretazione delle misure spettroscopiche. L'utilizzazione delle diverse metodologie sarÃ¨ esemplificata in alcuni casi mediante esercitazioni al computer.

AttivitÃ di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni frontali e brevi esercitazioni/dimostrazioni

Contenuti :

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 densitÃ , metodi multiconfigurazionali e multireference
3. Teoria dei responsi lineari
4. Descrizione stocastica dei moti molecolari

ModalitÃ di esame :

Esame orale, con la possibilitÃ di concordare la discussione di un problema specifico con il docente e di discutere un breve elaborato.

Criteri di valutazione :

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

Testi di riferimento :

CONTENUTO NON PRESENTE

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Dispense ed appunti di lezione.

CONTROLLO E QUALITÀ IN CHIMICA ANALITICA

(Titolare: da definire) Insegnamento non attivato per l'a.a 2013/2014

Periodo: I anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU
Sede dell'insegnamento : Dipartimento di Scienze Chimiche

Prerequisiti :

CONTENUTO NON PRESENTE

Conoscenze e abilita' da acquisire :

CONTENUTO NON PRESENTE

AttivitÃ di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

CONTENUTO NON PRESENTE

Contenuti :

CONTENUTO NON PRESENTE

ModalitÃ di esame :

CONTENUTO NON PRESENTE

Criteri di valutazione :

CONTENUTO NON PRESENTE

Testi di riferimento :

CONTENUTO NON PRESENTE

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

CONTENUTO NON PRESENTE

CRISTALLOGRAFIA E BIO-CRISTALLOGRAFIA

(Titolare: Prof. ROBERTO BATTISTUTTA)

Periodo: I anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni

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

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. 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 ρ termico \bullet 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 (ρ data reduction \bullet).

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 ρ density modification \bullet .

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 ρ cristallografia \bullet . 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: Il anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU

Sede dell'insegnamento : Dipartimento di Scienze Chimiche

Prerequisiti :

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

Conoscenze e abilità da acquisire :

Sistemi elettrochimici, cinetica elettrochimica, reazioni di trasferimento elettronico, microscopie elettrochimiche a scansione di sonda.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni d'aula e discussioni su argomenti specifici.

Contenuti :

Proprietà generali di equilibrio e non-equilibrio dei sistemi elettrochimici. Cinetica elettrochimica. 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. Teoria di Marcus e sviluppi successivi.

Effetto della distanza sui trasferimenti elettronici. Trasferimento elettronico dissociativo. Trasferimento elettronico attraverso monostrati auto-assemblati. Metodi sperimentali più diffusi per lo studio delle cinetiche elettrochimiche. Tecniche di microscopia a scansione di sonda, con particolare riguardo ad applicazioni elettrochimiche. Conductive atomic force microscopy. Scanning tunneling microscopy. Scanning electrochemical microscopy.

Modalità di esame :

Esame scritto basato su una serie di test intermedi, da sostenere durante il semestre, ed uno finale, da sostenere in corrispondenza del primo appello utile.

Criteri di valutazione :

Esame e partecipazione attiva al corso.

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.

IL BREVETTO IN CHIMICA

(Titolare: da definire)

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

Prerequisiti :
Cultura chimica di base.

Conoscenze e abilita' da acquisire :

Il corso ha lo scopo di fornire ai partecipanti una preparazione preliminare sui diritti di propriet  industriale ed in particolare sui brevetti in ambito chimico. I partecipanti acquisiranno le conoscenze di base necessarie per impostare ed effettuare ricerche brevettuali in banche dati; per leggere e valutare brevetti e domande di brevetto e per capire quali invenzioni sono brevettabili. Saranno in grado di comprendere le principali problematiche di natura brevettuale che sottostanno alla ricerca e sviluppo ed alla tutela della propriet  industriale in campo chimico ed in settori “limitrofi” (nanotecnologie, scienze dei materiali) Diventer  inoltre patrimonio comune un linguaggio specialistico necessario per favorire la comunicazione in questa materia. Il riferimento a Case Study in ambito chimico e fisico-chimico nei quali il docente   stato coinvolto, verr  utilizzato per facilitare l’ apprendimento dei contenuti trattati.

Attivit  di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni in aula con proiezione di presentazioni PowerPoint. Discussione di Case Study. Sono previste esercitazioni di ricerche in banche dati in aula assieme agli studenti.

Contenuti :

La propriet  industriale e la sua importanza. Il concetto di brevetto ed i requisiti di brevettabilit  nell’evoluzione dei sistemi brevettuali in Italia ed all’ estero. Le convenzioni Internazionali: la Convenzione di Parigi, il Trattato di Washington (Patent Cooperation Treaty PCT), la Convenzione di Monaco (European Patent Convention - EPC), accordi TRIPs (cenni). La struttura di una domanda di brevetto. Strategie di brevettazione: deposito secondo la via nazionale, regionale o internazionale. Il nuovo brevetto unitario; il brevetto italiano ed il rapporto di ricerca UIBM/EPO; brevetti EP, US, domande PCT. Il concetto di famiglia brevettuale di stato legale di un brevetto. I sistemi di classificazione brevettuale: IPC e CPC (Cooperative Patent Classification) Brevetti di prodotto, di procedimento, di perfezionamento, di combinazione e di traslazione. Brevetti dipendenti: il concetto di libert  di attuazione (FTO). Particolarit  dei brevetti in campo chimico, nanotecnologico e farmaceutico. Durata dei brevetti. SPC, CCP, PTE. Il reperimento di informazioni brevettuali: piattaforme di ricerca commerciali, i siti internet europei ed americani. gli strumenti offerti dall’ universit  . Tipologie di ricerche brevettuali: ricerche di anteriorit  , di stato dell’ arte, Freedom To Operate. Technology Intelligence: uso competitivo del contenuto informativo brevettuale. Cenni ad alti diritti di Propriet  Intellettuale (IP) di interesse per il settore chimico: il marchio ed il know-how. Applicazioni e strategie IP: brevettare, pubblicare o mantenere il segreto ? Le invenzioni dei dipendenti. La contraffazione di brevetti: presentazione di un Case Study. La concorrenza sleale. IP Life Cycle e principi di trasferimento tecnologico. Introduzione al licensing di brevetti ed alla valutazione economica dei brevetti; I brevetti delle Universit  ed il ruolo dei KTO (Knowledge Transfer Office). Sbocchi occupazionali nel mondo dei brevetti.

Modalit  di esame :

Esame scritto

Criteri di valutazione :

La valutazione della preparazione dello studente sia baser  su un test scritto con domande a risposta multipla. Il test   costruito in modo da valutare correttamente la comprensione degli argomenti svolti, l’acquisizione dei concetti e delle metodologie proposte e la capacit  di applicarli in modo autonomo e consapevole.

Testi di riferimento :

Diego De Vita, Brevettare   facile. : Finanze & Lavoro, 2010

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Testi di consultazione: AA.VV. “Codice della Propriet  Industriale spiegato Articolo per Articolo” ed. Gruppo Editoriale Esselibri-Simone (2010) Verr  inoltre fornita una bibliografia e riferimenti web ad argomenti e/o articoli pi  specialistici.

Presentazioni Power Point ed appunti di lezione ad integrazione dei contenuti non coperti nel testo.

MAGNETOCHEMICA

(Titolare: Prof. MARCO RUZZI)

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

Conoscenze e abilita' da acquisire :

Il corso si propone di fornire le basi per la comprensione delle propriet  collettive di materiali magnetici a partire dalle propriet  magnetiche di atomi, radicali e cluster magnetici (Magnetochemistry), e degli effetti delle propriet  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.

Contenuti :

Introduzione alla fenomenologia e ai principi relativi al magnetismo di bulk. Diamagnetismo e paramagnetismo. Magnetismo d'ordine e di cooperazione: ferromagnetismo, antiferromagnetismo, metamagnetismo, ferrimagnetismo. Misure di suscettività magnetica scalare. Tecniche sperimentali basate sull'interazione con campi magnetici. La magnetometria SQUID. Tecniche NMR. Origine del paramagnetismo. Atomi a π elettroni. Composizione di momenti angolari orbitalici e di momenti magnetici di spin. Interazioni spin-orbita. Termini spettrali e separazioni di multipletto. Sistemi magneticamente diluiti. Atomi in campi magnetici. Effetto Zeeman su stati di multipletto. Paramagnetismo molecolare. Annullamento delle componenti angolari orbitaliche. Relazione tra tensore g e struttura molecolare. Spettroscopia EPR. Hamiltoniani e funzioni d'onda nello spazio degli spin. Interazioni dipolari spin-spin e interazioni di scambio. Descrizione di specie paramagnetiche stazionarie e transienti in materiali molecolari. Stati ad elevata molteplicità di spin e a carica separata. Effetti dello spin elettronico sulla dinamica di stati fotoeccitati. Influenza dei processi spin-selettivi sull'efficienza fotovoltaica di film polimerici per celle solari organiche. Nanomagneti molecolari: origine del magnetismo in sistemi di molecola singola e cluster di ioni. Alcune applicazioni in ambito spintronico.

Testi di riferimento :

A. F. Orchard, Magnetochemistry. : ,

R. L. Carlin, Magnetochemistry. : ,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Dispense di lezione

MECCANISMI DI REAZIONE IN CHIMICA INORGANICA

(Titolare: Prof. MARINO BASATO)

Periodo: Il anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU

Sede dell'insegnamento : Dipartimento di Scienze Chimiche

Prerequisiti :

I corsi di Chimica Inorganica 1 e 2.

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 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.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Il corso prevede 48 ore di aula i cui contenuti saranno illustrati con diapositive.

I ritmi della lezione sono pensati in modo da garantire agli studenti una comprensione diretta degli argomenti trattati e la stesura di appunti dettagliati.

L'avanzamento delle conoscenze e la loro comprensione vengono continuamente verificati suscitando domande e commenti agli studenti.

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 tetraordinati 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.

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 :

R. G. Wilkins, Kinetics and Mechanisms of Reaction of Transition Metal Complexes. : ,

R. H. Crabtree, The Organometallic Chemistry of the Transition Metals. : ,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Diapositive di lezione fornite agli studenti.

MECCANISMI DI REAZIONE IN CHIMICA ORGANICA

(Titolare: Prof.ssa MARCELLA BONCHIO)

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU

Sede dell'insegnamento : Dipartimento di Scienze Chimiche

Prerequisiti :

Chimica Organica 1, 2 e 3. Nozioni di base di termodinamica.

Conoscenze e abilità da acquisire :

Fornire gli strumenti concettuali per lo studio dei meccanismi delle reazioni organiche.

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. 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 σ^+ , eq. di Yukawa-Tsuno. Correlazioni multiparametriche, eq. di Taft-Ingold. Cenni QSAR. 4. Effetto solvente Effetto solvente su equilibri e velocità 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 sostituenti sulla basicità. 6. Catalisi acido-base Cinetica dei processi catalizzati e non. Catalisi elettrofila. Catalisi acida e basica, specifica e generale: implicazioni meccanicistiche. Effetti isotopici in catalisi acida e basica. 7. Reazioni pericicliche Meccanismi possibili per le reazioni pericicliche. Diagrammi di correlazione e teoria degli orbitali di frontiera. Cicloaddizioni [4+2] e [2+2] termiche e fotochimiche. Cicloaddizioni [4+2]: effetti strutturali su reattività e regioselettività. Reazioni elettrocicliche termiche e fotochimiche. Trasposizioni sigmatropiche. Esempi di cicloaddizioni in sintesi. Cicloaddizioni 1,3-dipolari. Reazioni chelotropiche.

Testi di riferimento :

F. A. Carey, R. J. Sundberg, *Advanced Organic Chemistry*. : ,

H. Maskill, *Structure and Reactivity in Organic Chemistry*. : ,

N. Isaacs, *Physical Organic Chemistry*. : ,

METODI FISICI IN CHIMICA ORGANICA

(Titolare: Prof.ssa CRISTINA PARADISI) - Mutuato da:

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

Prerequisiti :

Buone conoscenze di chimica organica

Conoscenze e abilità da acquisire :

Identificazione di composti organici ragionevolmente complessi attraverso analisi degli spettri NMR (^1H e ^{13}C) e di massa. Introdurre le procedure avanzate di NMR e spettrometria di massa.

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. Spostamento chimico. Accoppiamento scalare. Equivalenza chimica ed equivalenza magnetica. Spettri del primo ordine e di ordine superiore. Diastereotopismo. NMR dinamico. Doppia risonanza e disaccoppiamento. Reagenti di shift. Determinazione di eccesso enantiomerico. Spettroscopia ^{13}C -NMR. Effetto Nucleare Overhauser. Introduzione alle 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.

Modalità di esame :

Esame scritto

Criteri di valutazione :

La valutazione è basata sulla comprensione degli argomenti proposti e sull'abilità di applicarli all'identificazione di sostanze incognite delle quali vengono forniti i dati spettroscopici.

Testi di riferimento :

H. Friebolin, *Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy*. : ,

R. M. Silverstein, F. X. Webster, *Identificazione Spettroscopica di Composti Organici*. : ,

J. R. Chapman, *Practical Organic Mass Spectrometry*. : ,

H. Günther, *NMR Spectroscopy*. : ,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Dispense ed appunti di lezione.

MODELLI E METODI DI INDAGINE PER SISTEMI NANOSTRUTTURATI

(Titolare: da definire) Insegnamento non attivato per l'a.a 2013/2014

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

Prerequisiti :
CONTENUTO NON PRESENTE
Conoscenze e abilità da acquisire :
CONTENUTO NON PRESENTE
Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :
CONTENUTO NON PRESENTE
Contenuti :
CONTENUTO NON PRESENTE
Modalità di esame :
CONTENUTO NON PRESENTE
Criteri di valutazione :
CONTENUTO NON PRESENTE
Testi di riferimento :
CONTENUTO NON PRESENTE
Eventuali indicazioni sui materiali di studio :
CONTENUTO NON PRESENTE

PRINCIPI E APPLICAZIONI DELLA CHIMICA METALLO-ORGANICA

(Titolare: Prof. ANDREA BIFFIS)

Periodo: I anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU
Sede dell'insegnamento : Dipartimento di Scienze Chimiche

Prerequisiti :
Cultura chimica di base impartita nella Laurea triennale in Chimica o in Chimica Industriale
Conoscenze e abilità da acquisire :
Costituiscce 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. Formalismi, definizioni e nomenclatura. 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, metalloalchini, composti allilici, polienilici e polienici.

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 proposti e la capacità di applicarli in modo autonomo e consapevole.

Testi di riferimento :
C. Elschenbroich, Organometallics. Weinheim: Wiley-VCH, 2006

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Appunti di lezione

Presentazioni PowerPoint di lezione

Testo di riferimento

Testi di consultazione (disponibili presso il docente ovvero presso la Biblioteca del Dipartimento di Scienze Chimiche):

J. Hartwig, "Organotransition metal chemistry", University Science Books, Sausalito, 2010.

R. H. Crabtree, "The Organometallic Chemistry of the Transition Metals", 5th ed., Wiley, New York 2009.

"Comprehensive Organometallic Chemistry", M. P. Mingos, R. H. Crabtree (eds.), Elsevier, Amsterdam 2007.

"Transition Metals for Organic Synthesis", M. Beller, C. Bolm (eds.), 2nd ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2004.

"Applied Homogeneous Catalysis with Organometallic Compounds", B. Cornils, W. A. Herrmann (eds.), 2nd ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2002.

L. S. Hege, "Transition Metals in the Synthesis of Complex Organic Molecules", 2nd ed., University Science Books, Sausalito 1999.

PROCESSI CHIMICI ECO-COMPATIBILI

(Titolare: da definire) Insegnamento non attivato per l'a.a 2013/2014

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

Prerequisiti :
CONTENUTO NON PRESENTE
Conoscenze e abilità da acquisire :
CONTENUTO NON PRESENTE
Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :
CONTENUTO NON PRESENTE
Contenuti :
CONTENUTO NON PRESENTE
Modalità di esame :
CONTENUTO NON PRESENTE
Criteri di valutazione :
CONTENUTO NON PRESENTE
Testi di riferimento :
CONTENUTO NON PRESENTE
Eventuali indicazioni sui materiali di studio :
CONTENUTO NON PRESENTE

PROPRIETÀ OTTICHE DI SISTEMI MOLECOLARI

(Titolare: Prof. RENATO BOZIO)

Periodo: I anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU
Sede dell'insegnamento : Dipartimento di Scienze Chimiche

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 processi fotochimici.

Contenuti :
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 risposta 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 fotochimiche. Cenni di spettroscopia ottica non lineare nel dominio dei tempi e delle frequenze.

Testi di riferimento :
CONTENUTO NON PRESENTE
Eventuali indicazioni sui materiali di studio :
Da concordare con il docente.

PROVA FINALE

(Titolare: da definire)

Periodo: Il anno, annuale
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: ; 40,00 CFU

Prerequisiti :
CONTENUTO NON PRESENTE
Conoscenze e abilità da acquisire :
CONTENUTO NON PRESENTE
Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :
CONTENUTO NON PRESENTE
Contenuti :
CONTENUTO NON PRESENTE
Modalità di esame :
CONTENUTO NON PRESENTE
Criteri di valutazione :
CONTENUTO NON PRESENTE
Testi di riferimento :
CONTENUTO NON PRESENTE
Eventuali indicazioni sui materiali di studio :
CONTENUTO NON PRESENTE

SINTESI E REATTIVITÀ INORGANICA

(Titolare: Prof. LUCIANO PANDOLFO) - Mutuato da:

Periodo: I anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 24A+36L; 6,00 CFU
Sede dell'insegnamento: Dipartimento di Scienze Chimiche.

Prerequisiti :

Conoscenze di base di chimica inorganica, organica e di coordinazione.

Conoscenze e abilità da acquisire :

Conoscenza 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.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni frontali e esercitazioni di laboratorio.

Contenuti :

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 (organico-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 σ -donor/acceptor (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.

Modalità di esame :

Prova orale

Criteri di valutazione :

Svolgimento di una prova orale con discussione delle relazioni di laboratorio.

Testi di riferimento :

J.W. Steed, J. L. Atwood, *Supramolecular Chemistry*, Wiley, 2000

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Copia delle diapositive Power Point utilizzate a lezione, software di elaborazione grafica Mercury.

SINTESI E REATTIVITÀ ORGANICA

(Titolare: Prof. TOMMASO CAROFIGLIO)

Periodo: I anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU
Sede dell'insegnamento: Dipartimento di Scienze Chimiche

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.

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.

Testi di riferimento :

CONTENUTO NON PRESENTE

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 CFU
Sede dell'insegnamento: Dipartimento di Scienze Chimiche

Conoscenze e abilità da acquisire :

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.

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. 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 impulsive di risonanza magnetica (FID, eco di spin, $\text{â€}i$). 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.

Testi di riferimento :

J. A. Weil, J. R. Bolton, and J. E. Wertz, *Electron Paramagnetic Resonance: Elementary Theory and Practical Applications*. : ,
H. Günther, *NMR Spectroscopy: Basic Principles, Concepts, and Applications in Chemistry*. : ,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Dispense di lezione.

STRUTTURA E DINAMICA DI PROTEINE

(Titolare: Dott. MASSIMO BELLANDA)

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

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 pi¹ 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 deuteroazione per lo studio di proteine grandi.
11. NMR in sistemi orientati: Residual Dipolar Couplings.
12. Interazioni proteina-proteina e proteina-ligando.
13. Produzione di proteine 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
Q. Teng, *Structural Biology: Practical NMR Applications*. : Springer, 2005
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

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.

TECNOLOGIE ANALITICHE

(Titolare: Prof.ssa SARA BOGIALLI) - Mutuato da: Laurea magistrale in Scienze e Tecnologie per l'Ambiente e il Territorio

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU
Sede dell'insegnamento : Dipartimento di Scienze Chimiche

Prerequisiti :

Non sono previste propedeuticit  . Tuttavia, per la comprensione dei contenuti risultano fondamentali le conoscenze acquisite nei corsi di Chimica Analitica e di Chimica Ambientale II del Corso di Laurea Triennale e magistrale.

Conoscenze e abilita' da acquisire :

- Conoscenza della normativa di riferimento in materia di ripristino ambientale e gestione dei siti contaminati.
- Capacit  di comprensione delle dinamiche di contaminazione ambientale nelle diverse matrici di interesse.
- Comprensione degli elementi principali delle analisi di rischio.
- Conoscenza delle principali tecniche di risanamento ambientale.
- Conoscenza delle principali tecniche di caratterizzazione degli inquinanti.

Per quanto riguarda il laboratorio:

- Acquisizione dei fondamenti di gestione completa di un'analisi ambientale: dal campionamento alla determinazione finale

Attivit  di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

- Lezioni di aula
- Visite a stabilimenti
- Esercitazioni di laboratorio

Contenuti :

Il corso   diviso in due parti. La Prima Parte (16 ore di lezione, 2 C.F.U.) del corso riguarda :

La Seconda Parte (16 ore di lezione, 2 CFU)   dedicata alla caratterizzazione dei processi dinamici di ripartizione degli inquinanti in siti ambientali e alle tecniche di bonifica:

- Scenari di contaminazione dei siti da bonificare. Descrizione delle interazioni suolo-acqua-aria nelle contaminazioni.
- strategie di bonifica in situ ed ex situ
- bioremediation
- analisi target e non target per la caratterizzazione degli inquinanti

Modalit  di esame :

Orale.

Necessaria consegna di una relazione sulle esperienze di laboratorio

Criteri di valutazione :

Livello di comprensione dei principi chimico-fisici alla base dei fenomeni studiati. Conoscenza dei principi e dei dettagli delle tecniche e delle strumentazioni illustrate nel corso. Conoscenza della terminologia tecnico-scientifica propria della materia.

Testi di riferimento :

CONTENUTO NON PRESENTE

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Appunti di lezione.

Materiale didattico fornito dal docente o disponibile presso il sito web dei docenti.

Testi consigliati

TIROCINIO FORMATIVO

(Titolare: Prof. MAURO SAMBI)

Periodo: Il anno, 1 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: ; 7,00 CFU