



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DI PADOVA

SCUOLA DI SCIENZE

Bollettino Notiziario

Anno Accademico 2014/2015

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: 32A+24L; 6,00 CFU

Prerequisiti :

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

Conoscenze e abilità da acquisire :

In relazione alle principali norme comunitarie e nazionali in materia ambientale, in particolare quelle riguardanti la qualità dell'aria e delle acque, il corso introduce gli studenti alle principali tecniche e metodiche di campionamento ed analisi impiegate nello studio dei processi e delle matrici ambientali.

In particolare il corso verte su:

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

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

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

Contenuti :

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

- Inquinamento atmosferico e la rete di monitoraggio della qualità dell'aria.
- Gli analizzatori automatici per la misura dell'inquinamento atmosferico.
- Origine, le proprietà 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) è 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.

Modalità 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 abilità da acquisire :

A partire dalle principali norme comunitarie e nazionali in materia ambientale, il corso introduce gli studenti alle principali tecniche e metodiche di campionamento ed analisi impiegate nello studio dei processi e delle matrici ambientali, con particolare attenzione alle problematiche legate all'inquinamento atmosferico. In particolare il corso prevede:

- Introduzione alle problematiche e ai processi ambientali
- Fenomeni ed effetti locali e/o globali
- Elementi di legislazione EU e IT
- Tecniche e Metodologie di analisi di matrici ambientali
- Regolamenti europei REACH e CLP

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

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

Contenuti :

Il corso Ãˆ diviso in due parti. La Prima Parte (40 ore di lezione, 5 CFU) 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 :

CONTENUTO NON PRESENTE

Conoscenze e abilitÃ 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

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 abilitÃ 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 industriali, asimmetriche e alla risoluzione dei racemati. Peptidi: classificazione e cenni agli elementi di struttura secondaria delle catene polipeptidiche. Principi di sintesi peptidica: gruppi protettori delle funzioni amminica, carbossilica e delle funzioni in catena laterale; attivazione della funzione carbossilica. Tattica e strategia di sintesi in soluzione e su supporto solido. 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

Prerequisiti :

Chimica Generale e Chimica Inorganica.

Conoscenze e abilità da acquisire :

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

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

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

Contenuti :

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

Modalità di esame :

Prova orale

Criteri di valutazione :

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

Testi di riferimento :

Ulrich Schubert, Nicola Hüsing, *Synthesis of Inorganic Materials*. : John Wiley & Sons, 2005

Anthony R. West, *Solid State Chemistry and its Applications*. : John Wiley & Sons, 2014

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 :

G. Granozzi, appunti di lezione. ; ,

E. M. McCash, Surface Chemistry. : Oxford University Press, 2001

K. Kolasinski, Surface Science. : John Wiley & Sons, 2002

Shriver and Atkins, Inorganic Chemistry. : Oxford University Press, 1999

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Dispense e lucidi messi a disposizione degli studenti

CHIMICA FARMACEUTICA

(Titolare: Prof. GIUSEPPE ZAGOTTO) - Mutuato da: Laurea magistrale in Chimica Industriale (Ord. 2013)

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

Prerequisiti :

Nessuno

Conoscenze e abilita' da acquisire :

Acquisire le nozioni basilari negli argomenti fondamentali della chimica farmaceutica e prendere in considerazione in modo dettagliato alcuni capitoli particolari scelti tra quelli proposti dagli studenti.

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 :

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

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

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Testi consigliati e appunti di lezione

CHIMICA FISICA 4

(Titolare: Prof. FLAVIO MARAN)

Periodo:

1 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 abilita' da acquisire :

Fornire agli studenti i concetti e gli strumenti metodologici di base per l'interpretazione a livello molecolare delle proprietà di fasi condensate, fenomeni spettroscopici (Modulo A), cinetica chimica, cinetica elettrochimica e trasferimento elettronico (Modulo B).

Contenuti :

Modulo A. Fondamenti di termodinamica statistica: distribuzioni di probabilità, ensemble statistici, statistica di Boltzmann, distribuzione delle velocità di Maxwell, equipartizione dell'energia. Applicazioni: proprietà termodinamiche di gas perfetto, capacità termica di solidi. Cenni alla struttura dei liquidi. Proprietà elettriche delle molecole (momento di dipolo e momenti di ordine superiore, polarizzabilità) e loro relazione con le proprietà dielettriche della materia. Applicazioni: costante dielettrica di liquidi, contributo elettrostatico all'energia libera di solvatazione. Interazioni intermolecolari: interazioni di coppia e loro espressioni in termini di grandezze molecolari. Applicazioni: energia reticolare di cristalli ionici, equazione di stato di fluido di van der Waals. Interazione radiazione elettromagnetica-materia: teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo, probabilità di transizione, regola d'oro di Fermi. Le esercitazioni riguarderanno applicazioni dei metodi sviluppati nella parte teorica del corso.

Modulo B. Parte del modulo riguarda la cinetica chimica. Dopo aver richiamato i concetti base, si discute l'effetto della temperatura sulle reazioni chimiche e l'equazione di Arrhenius. Si trattano quindi: la teoria delle collisioni e quella dello stato di transizione; le varie modalità di trasporto di massa; catalisi omogenea ed eterogenea. Un'altra parte del corso riguarda la cinetica elettrochimica, con particolare attenzione al controllo da parte del trasporto di massa e del trasferimento di carica. L'applicazione di tali concetti è condotta in relazione ai metodi elettrochimici più diffusi. Si introduce infine: la teoria di Marcus del trasferimento elettronico, e successive modifiche 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 :

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 :

P.W. Atkins e J. dePaula, Physical Chemistry. : Oxford University Press, 2002

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

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 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 lâ€™indagine spettroscopica della struttura e funzione delle proteine, degli acidi nucleici e di loro complessi. Fornire i mezzi per un approccio molecolare alla comprensione dei processi naturali.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni frontali accompagnate da slides ed esercizi in aula

Contenuti :

Il corso si articola nella descrizione di approcci e di tecniche chimico-fisiche utilizzati nello studio di proteine, sia solubili che di membrana, e di acidi nucleici secondo lo schema seguente:

- Spettroscopie ottiche di assorbimento UV-Visibile, di emissione applicate a proteine, cofattori, coenzimi, metallo-proteine e nucleotidi.
- Tecniche che utilizzano sonde fluorescenti: Energy transfer e FRET (Fluorescence Resonance Energy Transfer) imaging, quenching, immunofluorescenza, con accenni di microscopia confocale.
- Dicroismo circolare e sue applicazioni nello studio conformazionale di proteine.
- Tecniche EPR convenzionali ed avanzate per lâ€™indagine strutturale e funzionale in biologia. Applicazioni allo studio di metallo-proteine e di proteine a trasferimento elettronico. Tecnica di spin labelling associata a mutagenesi sito specifica (SDSL) e applicazioni EPR.

Modalità di esame :

esame scritto

Criteri di valutazione :

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

Testi di riferimento :

CONTENUTO NON PRESENTE

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Appunti di lezione, materiale messo a disposizione dal docente

CHIMICA FISICA DELLO STATO SOLIDO E DEI MATERIALI

(Titolare: Prof. 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

Prerequisiti :

Lo studente deve possedere concetti e nozioni di base della Fisica (meccanica, dinamica ed elettromagnetismo). È necessaria la conoscenza alcuni elementi di meccanica quantistica (operatori, autofunzioni e autovalori, le soluzioni dei piÃ¹ comuni problemi elementari, metodi approssimati). Sono inoltre date per acquisiti i concetti di legame chimico, di forze intermolecolari e alcune nozioni di spettroscopia a livello dei corsi di laurea triennale e del corso parallelo (I anno, I semestre della laurea magistrale) di Chimica Fisica IV.

Conoscenze e abilità da acquisire :

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

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

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

Contenuti :

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

Modalità di esame :

Esame orale finale

Criteri di valutazione :

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

Testi di riferimento :

C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*. New York, Chichester: John Wiley & Sons,

G. Strobl, *Condensed matter physics*. Berlin: Springer,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Copie delle diapositive utilizzate nel corso delle lezioni saranno scaricabili dalla piattaforma Moodle del dipartimento. Saranno messe a disposizione anche note di lezione integrative.

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.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

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

Contenuti :

Teoria dei gruppi in chimica inorganica. Sviluppo formale dell'argomento e delle sue applicazioni per lo studio dei composti inorganici. Proprietà elettroniche, vibrazionali e magnetiche dei complessi dei metalli di transizione. Le lezioni in 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 in 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 $1f$;
9. Complessi ottaedrici ML6 di tipo $1e$;
10. Campo debole;
11. Campo forte;
12. Diagrammi di Tanabe-Sugano;
13. Applicazione della spettroscopia elettronica allo studio delle proprietà elettroniche dei complessi dei metalli di transizione;
14. Metodo della simmetria discendente;

Modalità di esame :

Esame scritto

Criteri di valutazione :

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

Testi di riferimento :

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

Robert L. Carter, *Molecular Symmetry and Group Theory*. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1998

U. Schubert, N. Hüsing, *Synthesis of inorganic materials*. ,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

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

CHIMICA INORGANICA AVANZATA

(Titolare: Prof. MAURIZIO CASARIN)

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

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

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

Contenuti :

Parte I

Equazione di Schroedinger; funzioni d'onda radiali (polinomi di Laguerre) ed angolari (armoniche sferiche, polinomi associati di Legendre); orbitali reali come combinazioni lineari di armoniche sferiche; nodi radiali ed angolari; funzioni d'onda polielettroniche; determinanti di Slater; proprietà degli operatori $L^2, L, L_x, L_y, L_z, S^2, S, S_x, S_y, S_z$; 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

Criteri di valutazione :

L'esame orale sarà valutato secondo i seguenti criteri:

aderenza delle risposte alle domande proposte;

esatta distinzione tra quadro generale e nozioni di dettaglio;

proprietà e sicurezza di linguaggio.

Testi di riferimento :

J. S. Griffith, *The Theory of Transition-Metal Ions.* ; ,

Robert L. Carter, *Molecular Symmetry & Group Theory.* ; ,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Con l'ovvia eccezione dei testi consigliati, il docente mette a disposizione degli studenti tutto il materiale preso in considerazione a lezione nonché eventuali articoli per approfondire ulteriormente quanto considerato in aula.

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 :

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

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.

2. 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.

3. 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.

4. Esame di classi di reazioni organiche con analisi della letteratura attuale.

Testi di riferimento :

CONTENUTO NON PRESENTE

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

Conoscenze e abilità da acquisire :

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

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

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

Contenuti :

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

Modalità di esame :

L'esame orale verterà sui contenuti del corso e sulla discussione di un lavoro recente di letteratura attinente alle tematiche del corso.

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 applicare tali concetti e tecnologie per la comprensione e esposizione di un lavoro di letteratura attinente ai contenuti del corso.

Testi di riferimento :

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

Eliel and Wilen, *Stereochemistry of Organic Compounds*. : Wiley, 1994

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: 1 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 può inoltre trovare appoggio e spunti di approfondimento in alcuni dei tesi in suo possesso sulla chimica fisica organica o nei numerosi trattati di chimica supramolecolare disponibili in commercio.

CHIMICA TEORICA

(Titolare: Prof. 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 abilità 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 l'interpretazione delle misure spettroscopiche. L'utilizzazione delle diverse metodologie sarÃ esemplificata in alcuni casi mediante esercitazioni al computer.

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

Modalità di esame :

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

Criteri di valutazione :

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

Testi di riferimento :

CONTENUTO NON PRESENTE

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Dispense ed appunti di lezione.

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 verrÃ dato ai piÃ recenti ed avanzati sviluppi delle tecniche cristallografiche, applicate principalmente allo studio delle macromolecole biologiche. Il corso sarÃ 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 di scattering; principi geometrici della diffrazione, legge di Bragg, sfera di Ewald e coppie di Friedel; diffusione anomala e coppie di Bijvoet.

Strumentazione e tecniche di raccolta dei dati di diffrazione: panoramica, elaborazione dei dati (data reduction).

Dai dati di diffrazione alla densità elettronica: introduzione; trasformata di Fourier e diffrazione; il problema della fase; funzione di Patterson e mappe di Patterson.

Metodi per l'ottenimento delle fasi: come si risolve il problema della fase; metodi basati sulla sottostruttura di atomi marcatori; sostituzione isomorfa (MIR, SIR), diffusione anomala (SAD, MAD), SIRAS, metodi diretti, sostituzione molecolare; miglioramento delle fasi, tecniche di density modification.

Costruzione e affinamento del modello: principi e aspetti pratici.

Validazione e analisi del modello: valutazione critica del modello molecolare, accuratezza e valutazione critica della sua qualità.

Guida alla lettura di un articolo di cristallografia. Esempi di ottenimento della struttura 3D di proteine.

Modalita' di esame :

Esame orale.

Criteri di valutazione :

Comprensione degli argomenti trattati e capacit  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 abilita' da acquisire :

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

Contenuti :

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

Modalita' di esame :

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

Testi di riferimento :

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

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Appunti di lezione.

Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications, di A. J. Bard e L. R. Faulkner, 2a edizione, Wiley, 2001.

Ulteriore materiale sar  fornito dal docente.

IL BREVETTO IN CHIMICA

(Titolare: Dott. SILVANA LORENZI)

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   indirizzato a fornire una preparazione di base sui diritti di propriet  industriale, in particolare in ambito chimico e settori correlati. Saranno fornite conoscenze di base su tre aspetti fondamentali:

- che cosa   un'invensione e quali invenzioni sono brevettabili;
- come definire un'invensione in campo chimico e settori correlati ai fini brevettuali; e
- quali sono gli strumenti procedurali per ottenere una tutela legale dei diritti di brevetto in Italia e all'estero.

Lo scopo   permettere ai partecipanti al corso di:

- capire le problematiche connesse all'identificazione di un'invensione rispetto al normale progresso tecnico del settore;
 - leggere un documento brevettuale e capire il significato del linguaggio tecnico usato ai fini della tutela legale dell'invensione.
- Allo scopo alla teoria sar  affiancata l'analisi di casi pratici.

Attivita' di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Presentazioni in Powerpoint; analisi di casi pratici ed esercitazioni sui temi trattati.

Contenuti :

Le linee generali su cui sar  sviluppati il corso sono:

-   il concetto di invenzione;
-   il brevetto verso il segreto industriale;
-   i requisiti dell'invensione;

• i requisiti della domanda di brevetto;
• la funzione del brevetto;
• i diritti dell'inventore e del richiedente;
• la struttura della domanda di brevetto e le peculiarità del brevetto chimico (definizione dell'invenzione mediante la formula generale e i parametri funzionali; le tipologie di rivendicazioni ed il loro ambito);
• le procedure di deposito ed esame, con particolare riferimento all'esame secondo la normativa italiana (Codice della Proprietà Industriale) ed europea (EPC);
• le strategie di brevettazione e le convenzioni internazionali ed europee (la Convenzione Unionista di Parigi; gli accordi TRIPS; Il Patent Cooperation Treaty PCT; la European Patent Convention EPC ed il Brevetto Unitario).

Modalità di esame :

Esame scritto

Criteri di valutazione :

La valutazione si baserà su un test scritto a risposta multipla in modo di valutare la comprensione e l'acquisizione corretta dei concetti teorici ai fini di una loro applicazione autonoma.

Testi di riferimento :

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

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Testi di consultazione consigliati:

AA.VV. a cura di A. Vanzetti, *I nuovi brevetti. Biotecnologie ed Invenzioni Chimiche*, 1995, Giuffrè Editore

A. Vanzetti e V. Di Cataldo, *Manuale di Diritto Industriale*, 7ª ed., 2012, Giuffrè Editore

MAGNETOCIMICA

(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 abilità da acquisire :

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

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni frontali.

Contenuti :

Introduzione alla fenomenologia e ai principi relativi al magnetismo. Paramagnetismo e diamagnetismo. Magnetismo d'ordine e di cooperazione: ferromagnetismo, antiferromagnetismo, ferrimagnetismo.
Origine del paramagnetismo e del diamagnetismo. L'equazione di Brillouin e la legge di Curie. Teoria perturbativa di Van Vleck. Proprietà magnetiche dei metalli: paramagnetismo di Pauli e diamagnetismo di Landau.
Tecniche sperimentali per la misura della suscettività magnetica. La magnetometria SQUID. Tecniche NMR.
Introduzione ai momenti angolari e al magnetismo nelle molecole. Accoppiamento di momenti angolari. Hamiltoniani e funzioni d'onda nello spazio degli spin. Interazioni dipolari spin-spin e teoria dello Zero-Field splitting. Interazione di scambio: modelli di Heisenberg e di Ising.
Ioni paramagnetici dei metalli di transizione. Ioni liberi e ioni legati. Campo dei leganti. Hamiltoniano di spin degli ioni di transizione legati. Origine del ferromagnetismo in materiali inorganici.
Ferromagnetismo e antiferromagnetismo in cristalli molecolari.
Specie paramagnetiche stazionarie e transienti in materiali molecolari organici. Polarizzazione di spin in stati fotoeccitati. Teoria delle coppie radicaliche spin-correlate. Influenza di processi spin-selettivi sull'efficienza fotovoltaica di film polimerici per celle solari organiche.
Nanomagneti molecolari: magnetismo in sistemi di molecola singola (SMM) e cluster di ioni. Alcune applicazioni in ambito spintronico.

Modalità di esame :

Esame scritto.

Testi di riferimento :

A. F. Orchard, *Magnetochemistry*. ; ,

R. L. Carlin, *Magnetochemistry*. ; ,

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, I_a, I_d, D. Scale di nucleofilità. 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 cheletropiche.

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. ALESSANDRO BAGNO) - Mutuato da: Laurea magistrale in Chimica Industriale (Ord. 2013)

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 e concetti base della spettroscopia NMR e spettrometria di massa.

Conoscenze e abilità da acquisire :

Identificazione di composti organici moderatamente 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. 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. Günther, NMR Spectroscopy. ; ,

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

J. R. Chapman, Practical Organic Mass Spectrometry. ; ,

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

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Dispense ed appunti di lezione.

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 :

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

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni frontali con ausilio di presentazioni PowerPoint, fornite agli studenti

Contenuti :

Introduzione

I composti metallorganici: definizione. Aspetti storici. 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.

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

Prerequisiti :

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

Conoscenze e abilità da acquisire :

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

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

L'attività principale si svolge in forma di lezioni d'aula. Viene sollecitata la partecipazione attiva degli studenti riservando tempo a domande e risposte.

Contenuti :

1. Electromagnetic fields
2. Dielectric properties of materials and molecules
3. Time dependent perturbation theory of spectroscopy
4. Absorption, emission and scattering
5. Vibrational spectroscopy of polyatomic molecules
6. Transizioni elettroniche e vibroelettroniche: spettroscopia di assorbimento ed emissione di luminescenza.
7. Spettroscopia risolta nel dominio dei tempi per lo studio della dinamica e della fotofisica di sistemi molecolari.
8. Fotofisica e fotochimica degli stati aggregati,
 - 8.a Eccitoni di Frenkel.
 - 8.b Processi non radiativi: Processi di trasferimento di energia,
 - 8.c Trasferimento elettronico intra- ed intermolecolare.
9. Cenni di spettroscopia ottica non lineare nel dominio dei tempi e delle frequenze.

Modalità di esame :

Esame orale finale

Criteri di valutazione :

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

Testi di riferimento :

Jeanne L. McHale, *Molecular spectroscopy*. : Prentice-Hall, Inc.,

William W. Parson, *Modern Optical Spectroscopy*. : Springer-Verlag,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Vengono caricate sulla piattaforma Doodle, accessibile agli studenti per il download di file, le raccolte di diapositive utilizzate durante le lezioni per supportarle con materiale iconografico. I testi sono redatti in inglese.

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)

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: da definire)

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 teoriche e sperimentali delle spettroscopie magnetiche (NMR, EPR). Si forniranno esempi di applicazioni dei vari tipi di spettroscopie per la risoluzione di problemi chimico-fisici riguardanti struttura e funzioni molecolari.

Contenuti :

Introduzione alle spettroscopie magnetiche. Verranno richiamate le nozioni fondamentali relative a caratteristiche della radiazione elettromagnetica e 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 nucleare ed elettronica per sistemi a spin 1/2 e a spin 1. Rilassamenti di spin. Equazioni di Bloch. Tecniche impulsive di risonanza magnetica (FID, eco di spin, æ^{1}). NMR: tecniche di doppia risonanza e bidimensionali, tecniche di rilassometria. Cenni su NMR di stato solido. Tecniche avanzate di spettroscopia EPR: ENDOR, 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.

Modalità di esame :

Orale

Testi di riferimento :

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

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Dispense di lezione

Testi consigliati: nelle prime lezioni verrà fornita una lista esauriente di testi consigliati.

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 più comuni esperimenti NMR multidimensionali utilizzati per lo studio di macromolecole biologiche in soluzione. Verranno descritti gli esperimenti fondamentali per la raccolta dei dati necessari alla determinazione della struttura in soluzione di peptidi e proteine. Saranno anche trattati i metodi di analisi utili per l'interpretazione dei dati sperimentali. Infine, sarà descritto l'utilizzo di parametri NMR per l'ottenimento di informazioni sui moti delle proteine nelle diverse scale dei tempi.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni frontali e brevi esercitazioni

Contenuti :

1. Richiami ai principi di base dell'NMR.
2. Rilassamenti, accoppiamento dipolare, effetto nucleare Overhauser.
3. Aspetti pratici: strumentazione, acquisizione e trattamento del FID, caratteristiche del campione, soppressione del solvente.
4. Il formalismo degli operatori prodotto. Introduzione alla spettroscopia NMR bidimensionale. Concetto di coerenza.
5. Esperimenti 2D omonucleari: COSY e varianti, TOCSY, NOESY, ROESY.
6. Spettroscopia di correlazione eteronucleare inversa: INEPT, HSQC, HMQC.
7. Esperimenti 3D eteronucleari.
8. Utilizzo dei parametri NMR per la risoluzione della struttura di peptidi e proteine: pattern caratteristici di particolari strutture secondarie, metodi per calcolo di strutture dai dati NMR e valutazione della loro qualità.
9. Misure di rilassamento e dinamica molecolare.
10. Sistemi complessi: TROSY e 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 :

J. Cavanagh, *Protein NMR spectroscopy: principles and practice*. : Elsevier, 2007
Q. Teng, *Structural Biology: Practical NMR Applications*. : Springer, 2005

J. Keeler, Understanding NMR Spectroscopy. : John Wiley & Sons, 2010
T. D. W. Claridge, High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry. : Pergamon Press,
G.S. Rule and T.K. Hitchens, Fundamentals of Protein NMR Spectroscopy. : Springer, 2006
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.

TIROCINIO FORMATIVO

(Titolare: Prof. MAURO SAMBI)

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