



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DI PADOVA

SCUOLA DI SCIENZE

Bollettino Notiziario

Anno Accademico 2015/2016

Laurea magistrale in Chimica (Ord. 2015)

Curriculum: Corsi comuni

CHIMICA ANALITICA E AMBIENTE

(Titolare: Prof. ANDREA TAPPARO)

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

Prerequisiti :

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

Conoscenze e abilità da acquisire :

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

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

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

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

Contenuti :

Il corso è diviso in due parti. La Prima Parte (40 ore di lezione, 5 CFU) presenta alcuni fra gli aspetti più significativi della chimica dell'atmosfera e dell'inquinamento atmosferico:

- l'atmosfera, struttura e proprietà;
- la chimica della stratosfera e la riduzione dello strato di ozono;
- la chimica della troposfera e l'inquinamento atmosferico;
- la rete di monitoraggio della qualità dell'aria;
- gli analizzatori automatici per la misura dell'inquinamento atmosferico;
- l'origine, le proprietà e le tecniche di misura del particolato atmosferico;
- i cicli biogeochimici, con particolare riferimento al ciclo del carbonio;
- le conseguenze ambientali della produzione di energia, con particolare riferimento all'effetto dei gas-serra sul cambiamento climatico in atto;
- i protocolli internazionali (Kyoto e Montreal);
- l'inquinamento in ambiente industriale e la tutela della salute dei lavoratori (TLV);
- esempi di tecniche di monitoraggio ambientale.

La Seconda Parte (8 ore di lezione, 1 CFU) è dedicata ai Regolamenti REACH e CLP:

- i Regolamenti europeo CE 1907/2006 REACH e CE 1272/2008 CLP; la loro applicazione, problematiche e opportunità per il chimico moderno;
- Identificazione delle sostanze chimiche secondo REACH.

Modalità di esame :

Orale

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

Prerequisiti :

Sono molto importanti conoscenze di chimica inorganica.

Conoscenze e abilità da acquisire :

Il corso di chimica bioinorganica si inserisce nell'interfaccia fra la chimica inorganica e la biologia ed ha lo scopo di far conoscere agli studenti della laurea magistrale i principi di chimica di coordinazione impiegati nella ricerca in campo bioinorganico, nonché la funzione esercitata dagli elementi inorganici classici nella chimica degli esseri viventi, con particolare riguardo sia alla loro chimica in soluzione acquosa e all'importanza delle interazioni non-covalenti in biologia, sia alla struttura molecolare e alla funzione dei complessi metallici

con biomolecole. Il corso si articola in tre parti: a) Principi di chimica di coordinazione. b) Studio del ruolo degli elementi inorganici essenziali per le funzioni biologiche. c) La radioattività: nuclidi instabili ed emissioni radioattive, applicazioni in diagnostica e terapia medica.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Le lezioni frontali saranno tenute con l'ausilio di diapositive.

Gli studenti sono invitati ad essere presenti durante le lezioni e a prendere appunti in quanto i testi esistenti sono molto ampi 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; velocità di scambio dei leganti; reazioni di sostituzione e di trasferimento elettronico; strutture geometriche degli ioni metallici nei sistemi viventi e numero e geometria di coordinazione, costanti parziali e globali, tipi di leganti, effetto chelante, cenni alla teoria del campo cristallino (Complessi ottaedrici. Teoria del campo dei leganti. LFSE. Complessi a campo forte e debole. Fattori che influenzano il valore di delta. Serie spettrochimica). Energie di idratazione degli ioni metallici lungo la prima serie di transizione. Cinetica: velocità di reazione; complessi a sfera interna e sfera esterna, reazioni di sostituzione in complessi ottaedrici; meccanismi di Ia e Id, A, D. Reazioni di trasferimento elettronico. Termodinamica ed equilibrio: energia libera, energia di attivazione. Catalisi, catalizzatori biologici. b) Fondamenti di biochimica: proprietà delle molecole biologiche amminoacidi, proteine e loro struttura, acidi nucleici. Gruppi donatori per il legame con il metallo.

b) Fondamenti di biochimica: proprietà 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 (stabilità e solubilità 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'hemoglobina, mioglobina (uptake dell'ossigeno, cambi conformazionali, effetto Bohr), emeretina ed emocianina. Lo zinco negli esseri viventi: ruolo nei processi enzimatici e nei processi di riconoscimento molecolare (proteine zinc finger). Enzimi idrolasi, carbosipeptidasi, fosfatasi alcalina, fosfatasi acida porporea umana e delle piante. Ciclo di krebs, glicolisi, aconitase, anidrasi carbonica. Ruolo del ferro nei processi enzimatici di trasferimento elettronico. Proteine ed enzimi redox, centri redox pi 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 riduttasi, citocromo c ossidasi, ATP sintetasi.

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 :

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

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

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

S. J. Lippard, J. M. Berg, Principles of Bioinorganic Chemistry. Mill Valley, California: Ed. University Science Books,

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Le diapositive delle lezioni saranno messe a disposizione degli studenti.

CHIMICA DEI MATERIALI INORGANICI

(Titolare: da definire)

Periodo: 1 anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU

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 Husing, *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

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 FISICA 4

(Titolare: Prof.ssa ALBERTA FERRARINI)

Periodo: I anno, 1 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 64A+10E+12L; 10,00 CFU

Prerequisiti :

Conoscenze di base di Chimica Fisica e Fisica Generale.

Conoscenze e abilità da acquisire :

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

Contenuti :

Modulo A.

Fondamenti di termodinamica statistica: distribuzioni di probabilità, ensemble statistici, statistica di Boltzmann, distribuzione delle velocità di Maxwell, equipartizione dell'energia. Applicazioni: proprietà termodinamiche di gas perfetto, capacità termica di solidi. Cenni alla struttura dei liquidi.

Proprietà elettriche delle molecole (momento di dipolo e momenti di ordine superiore, polarizzabilità) e loro relazione con le proprietà dielettriche della materia. Applicazioni: costante dielettrica di liquidi, contributo elettrostatico all'energia libera di solvatazione.

Interazioni intermolecolari: interazioni di coppia e loro espressioni in termini di grandezze molecolari. Applicazioni: energia reticolare di cristalli ionici, equazione di stato di fluido di van der Waals.

Interazione radiazione elettromagnetica-materia: teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo, probabilità di transizione, regola d'oro di Fermi.

Le esercitazioni riguarderanno applicazioni dei metodi sviluppati nella parte teorica del corso.

Modulo B.

Parte del modulo riguarda la cinetica chimica. Dopo aver richiamato i concetti base, si discute l'effetto della temperatura sulle reazioni chimiche e l'equazione di Arrhenius. Si trattano quindi: la teoria delle collisioni e quella dello stato di transizione; le varie modalità di trasporto di massa; catalisi omogenea ed eterogenea. Un'altra parte del corso riguarda la cinetica 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 FLUIDI

(Titolare: Prof.ssa ALBERTA FERRARINI)

Periodo: I anno, 1 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU

Prerequisiti :

Sono considerati preliminari i corsi di Chimica Fisica.

Conoscenze e abilità da acquisire :

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

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Lezioni frontali.

Contenuti :

Nella prima parte del corso verranno introdotti i metodi della termodinamica statistica (distribuzioni statistiche, funzioni di partizione e grandezze termodinamiche). In particolare verranno esaminate le fluttuazioni di grandezze su scala microscopica e molecolare. Inoltre si presenteranno le tecniche sperimentali per lo studio della struttura e dell'ordine nei fluidi, considerando in particolare la diffrazione di raggi X e di neutroni.

Nella seconda parte del corso, utilizzando i concetti sviluppati nella prima parte, si tratteranno argomenti quali:

- Interazioni efficaci in sistemi dispersi e supramolecolari: interazioni idrofobiche, interazioni di van der Waals tra corpi estesi, interazioni elettrostatiche schermate (teoria di Debye-Hückel), forze entropiche.

- Polimeri: proprietà conformazionali ed elastiche di catene polimeriche (modelli di freely-jointed e worm-like chain), transizione coil-globulo.

- Transizioni di fase: separazione di fase in miscele e polimeri (teoria di Flory-Huggins); cristalli liquidi e cristalli colloidali (transizioni entropiche).

- Self-assembly di sistemi anfifilici: polimorfismo in soluzioni di tensioattivi e in microemulsioni, tensione superficiale, curvatura ed elasticità di membrane (modello di Helfrich).

Modalità di esame :

Esame orale.

Criteri di valutazione :

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

Testi di riferimento :

D. A. McQuarrie, *Statistical Mechanics*. New York: Harper and Row, 1976

R. A. L. Jones, *Soft Condensed Matter*. Oxford: OUP, 2002

R. Piazza, *Soft Matter. The Stuff That Dreams Are Made of*. Dordrecht: Springer, 2011

I. W. Hamley, *Introduction to Soft Matter, Synthetic and Biological Self-assembling Materials*. Chichester: Wiley, 2007

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

I docenti forniranno agli studenti materiale didattico su tutti gli argomenti trattati.

CHIMICA FISICA DEI SISTEMI BIOLOGICI

(Titolare: Prof.ssa DONATELLA CARBONERA)

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

Prerequisiti :

nessuno

Conoscenze e abilita' 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.

Modalita' di esame :

esame scritto

Criteri di valutazione :

Si valuterÃ la comprensione delle metodologie introdotte nel corso e la capacitÃ 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

Prerequisiti :

Lo studente deve possedere concetti e nozioni di base della Fisica (meccanica, dinamica ed elettromagnetismo). Ã 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 abilita' 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 proprietÃ dei materiali. Mira, altresÃ¬, 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'attivitÃ 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 attivitÃ 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 proprietÃ termiche
7. Elettroni nei cristalli
8. Metalli e semiconduttori
9. ProprietÃ fisiche dei cristalli. Principi generali
10. ProprietÃ dielettriche e ottiche degli isolanti
11. Materiali magnetici

Modalita' di esame :

Esame orale finale

Criteri di valutazione :

Lo studente dovrebbe dimostrare una comprensione dei principi generali e una capacitÃ 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 proprietÃ

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

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 σ ;
9. Complessi ottaedrici ML6 di tipo π ;
10. Campo debole;
11. Campo forte;
12. Diagrammi di Tanabe-Sugano;
13. Applicazione della spettroscopia elettronica allo studio delle proprietà elettroniche dei complessi dei metalli di transizione;
14. Metodo della simmetria discendente

Modalità di esame :

Esame scritto

Criteri di valutazione :

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

Testi di riferimento :

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

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

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

CHIMICA INORGANICA AVANZATA

(Titolare: Prof. MAURIZIO CASARIN)

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

Prerequisiti :

Solida preparazione in meccanica quantistica.

Conoscenze e abilità da acquisire :

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

Vleck-Kotani

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

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

Contenuti :

Parte I

Equazione di Schrodinger; 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 , S_x , S_y ; 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*. Cambridge, 2009

CHIMICA ORGANICA 4

(Titolare: Prof.ssa MARCELLA BONCHIO)

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

Prerequisiti :

Corsi di Chimica Organica fondamentali

Conoscenze e abilità da acquisire :

Disegno e interpretazione della reattività in chimica organica

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

lezioni frontali e di laboratorio in stretta connessione di contenuti con esercitazioni pratiche mirate e di approfondimento

Contenuti :

1. Studio dei meccanismi di reazione. Metodi per lo studio dei meccanismi di reazione. Richiami di termodinamica e cinetica. Relazione tra cinetica e meccanismo.

2. Intermedi reattivi, effetti strutturali e solvente, correlazioni di energia libera

3. Catalisi e Cinetica dei processi catalizzati e non. Catalisi elettrofila, Catalisi metallica, organo-catalisi e relazione con processi enzimatici

4. Esame di classi di reazioni organiche

Modalità di esame :

esame scritto e approfondimento orale

Criteri di valutazione :

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

Testi di riferimento :

Carey, Francis A.; Sundberg, Richard J., <<A: >> *Structure and mechanisms* Francis A. Carey and Richard J. Sundberg. New York etc.: Kluwer, Plenum, 0

Smith, Michael B., *March's advanced organic chemistry reactions, mechanisms, and structure* Michael B. Smith. Hoboken: Wiley, 2012

Anslyn, Eric V.; Dougherty, Dennis A., *Modern physical organic chemistry* Eric V. Anslyn, Dennis A. Dougherty. Sausalito: University Science Books, 0

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

lucidi di lezione e appunti personali

CHIMICA ORGANICA SUPERIORE

(Titolare: Prof.ssa GIULIA MARINA LICINI)

Periodo: 1 anno, 2 semestre
Indirizzo formativo: Corsi comuni
Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU

Conoscenze e abilita' 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 durante il corso. Sarà verificata anche la capacità di applicare tali concetti e tecnologie per la comprensione e esposizione di un lavoro di letteratura attinente ai contenuti del corso.

Testi di riferimento :

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

Elieil 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

Prerequisiti :

Conoscenze di base di termodinamica, chimica inorganica e chimica organica acquisite nei corsi caratterizzanti precedenti.

Conoscenze e abilita' 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

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

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

Introduzione alla diffrazione dei materiali policristallini (diffrazione di polveri).

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

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

Costruzione e affinamento del modello: principi e aspetti pratici.

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

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

Modalità di esame :

Esame orale.

Criteri di valutazione :

Comprensione degli argomenti trattati e capacità di applicarli.

Testi di riferimento :

Bernhard Rupp, *Biomolecular crystallography*. New York: Garland Science, 2010

Giacovazzo, Monaco, Artioli, Viterbo, Ferraris, Gilli, Zanotti, Catti, *Fundamentals of Crystallography, 2nd Edition*. Oxford: Oxford University Press, 2002

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Dispense di lezione

MECCANISMI DI REAZIONE IN CHIMICA INORGANICA

(Titolare: Prof.ssa CRISTINA TUBARO)

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU

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 inserzione, di addizione ossidativa e di eliminazione riduttiva. Un altro aspetto molto importante del corso è relativo all'effetto della natura del centro metallico sulla reattività dei leganti coordinati e all'uso di composti inorganici o metallorganici in reazioni metallo-catalizzate.

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

I contenuti del corso saranno illustrati con diapositive.

Contenuti :

Cenni di cinetica chimica e delle tecniche sperimentali per seguire il decorso di reazione.

Classificazione delle reazioni e dei meccanismi di reazione in chimica inorganica. Reazioni di sostituzione nucleofila ed elettrofila in chimica inorganica: meccanismi A, I_a, I_d, D. Scale di nucleofilicità. Relazioni fra geometria, configurazione elettronica e meccanismo.

Sostituzioni nucleofile su composti tetracoordinati a struttura tetraedrica o planare. Effetto trans.

Sostituzioni nucleofile su composti esacordinati.

Reazioni di inserzione, natura e meccanismi della reazione. Inserzione di CO e di alcheni.

Reazioni ossidoriduttive e trasferimenti elettronici. Meccanismi di trasferimento elettronico a sfera esterna: cenni sulla teoria di Marcus.

Meccanismi di trasferimento elettronico a sfera interna.

Reazioni di addizione ossidativa e di eliminazione riduttiva: natura e meccanismo delle reazioni.

Modifiche della reattività dei leganti per effetto della complessazione: il centro metallico come punto di raccolta dei reagenti e come distributore di densità elettronica nei leganti.

Catalizzatori e reazioni catalizzate.

Cicli catalitici. Ossidazione controllata degli alcheni; ossidazione dell'etilene ad aldeide acetica (processo Wacker). Idrogenazione degli alcheni. Idroformilazione degli alcheni. Reazioni di carbonilazione: sintesi di acido acetico da metanolo e ossido di carbonio. Reazioni di polimerizzazione. Metatesi di alcheni. Reazione di Heck.

Modalità di esame :

Orale

Criteri di valutazione :

L'esame orale sarà valutato secondo i seguenti criteri:

-aderenza delle risposte alle domande proposte;

-livello di comprensione e dettaglio;

-proprietà e sicurezza di linguaggio.

Testi di riferimento :

Crabtree, Robert H., <<The>> organometallic chemistry of the transition metals Robert H. Crabtree. 5. ed. -Hoboken: Wiley, 0

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Diapositive di lezione fornite agli studenti.

Testo per consultazione: R. G. Wilkins, *Kinetics and Mechanisms of Reaction of Transition Metal Complexes*.

PROPRIETÀ OTTICHE DI SISTEMI MOLECOLARI

(Titolare: Prof. RENATO BOZIO)

Periodo: I anno, 2 semestre

Indirizzo formativo: Corsi comuni

Tipologie didattiche: 48A; 6,00 CFU

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.

SINTESI E REATTIVITÀ ORGANICA

(Titolare: Prof. TOMMASO CAROFIGLIO)

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

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

Prerequisiti :

Nozioni di base di Fisica e Chimica quantistica.

Conoscenze e abilità da acquisire :

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

Attività di apprendimento previste e metodologie di insegnamento :

Il corso è basato sulle lezioni in aula che includeranno esercizi su problemi proposti dal docente anche tratti dalla letteratura scientifica.

Contenuti :

Introduzione alle spettroscopie magnetiche. Caratteristiche della radiazione elettromagnetica. Fenomeni di interazione tra radiazione e materia. Descrizione classica e formalismo quantomeccanico dei momenti magnetici. Proprietà dello spin di elettroni e nuclei. Hamiltoniano di spin. Equazioni di Bloch e rilassamenti di spin. Matrice densità e formalismo degli operatori prodotto. Tecniche impulsive

di risonanza magnetica (FID, eco di spin, sequenze complesse). Interazione Zeeman. Interazioni magnetiche di elettroni e nuclei. Risonanza di spin elettronico e nucleare di sistemi a spin $>1/2$. Zero Field Splitting. 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 per la risoluzione di problemi di chimica, scienza dei materiali e biochimica.

Modalita' di esame :

Esame orale

Criteri di valutazione :

Conoscenza dei concetti fondamentali delle risonanze magnetiche e capacit  di applicarli a situazioni sperimentali.

Testi di riferimento :

J. A. Weil, J. R. Bolton,, *Electron Paramagnetic Resonance: Elementary Theory and Practical Applications.* : J. Wiley & Sons, 2007

H. G nther, *NMR Spectroscopy: Basic Principles, Concepts, and Applications in Chemistry.* : J. Wiley & Sons, 1995

Eventuali indicazioni sui materiali di studio :

Dispense di lezione. Nelle prime lezioni verr  fornita una lista esauriente di testi consigliati.