

## Corso di studi: Chimica (Laurea magistrale)

Denominazione: Chimica

Dipartimento : CHIMICA E CHIMICA INDUSTRIALE Classe di appartenenza: LM-54 SCIENZE CHIMICHE

Interateneo: No

Interdipartimentale: No

Obiettivi formativi: Il Corso di Laurea Magistrale in Chimica si propone di formare laureati con una solida preparazione culturale nei principali settori di questa disciplina, preparazione adeguata per affrontare con competenza ed autonomia sia attività professionali che di ricerca accademica ed industriale, e per consentire l'accesso alla Scuola di Dottorato in Scienze Chimiche. Il percorso formativo si articola in 4 curricula (Chimico Analitico, , Chimico Fisico, Chimico Inorganico e Chimico Organico) ognuno dei quali comprende un blocco di insegnamenti obbligatori nelle discipline chimiche fondamentali, con l'obiettivo di completare la formazione di base acquisita con la Laurea, e di introdurre le conoscenze specialistiche più avanzate. Ciascun curriculum è poi caratterizzato da un gruppo di insegnamenti relativi alla disciplina prescelta ed alcuni insegnamenti di materie affini o integrative e si completa con le attività formative a scelta dello studente e con la prova finale nella forma di una tesi sperimentale da svolgersi sotto la guida di un docente universitario presso l'Università o presso aziende ed enti esterni. Il Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale comprende parecchi gruppi di ricerca operanti in diversi settori della Chimica, che possono fornire laboratori avanzati adatti allo svolgimento del lavoro di tesi. L'alto numero di crediti attribuito alla prova finale assicura lo svolgimento di una tesi sperimentale di ampio respiro, che permetterà allo studente di applicare il bagaglio culturale acquisito alla risoluzione di problematiche sperimentali anche complesse.

Numero stimato immatricolati: 50

Requisiti di ammissione: Per l'accesso al Corso di Laurea Magistrale in Chimica (classe LM-54) è necessaria una adeguata preparazione personale sulle seguenti materie: Matematica, Fisica e Informatica. Chimica di base: inorganica, organica, fisica, analitica, industriale e biologica. Occorre inoltre aver acquisito abilità pratica nei laboratori chimici. E' richiesta infine la conoscenza di una lingua dell'Unione Europea oltre all'italiano anche con riferimento ai lessici disciplinari. Possono accedere direttamente al Corso di Laurea Magistrale in Chimica i laureati triennali in possesso di una laurea affine dell'area scientifica o di altro titolo di studio equivalente, anche conseguito all'estero, riconosciuto idoneo. A questo proposito, lo studente dovrà avere acquisito nei Corsi di Studio precedenti almeno 80 crediti formativi complessivi nei settori scientifico-disciplinari CHIM/01-CHIM/12, almeno 24 crediti formativi nei settori FIS/01-FIS/08, MAT/01-MAT/09, ed almeno 6 crediti formativi nei settori BIO/10-BIO/15. La Commissione Didattica verificherà, caso per caso ed in via preliminare, le attività formative presenti nel curriculum precedente, con i relativi crediti formativi, e valuterà l'adequatezza della preparazione personale necessaria per poter seguire proficuamente il Corso di Laurea Magistrale. In mancanza dei requisiti curriculari richiesti, la Commissione Didattica valuterà se i requisiti curriculari mancanti siano stati comunque acquisiti quale contributo marginale di altre discipline o quale apporto extra-curriculare. Qualora la Commissione ritenga sufficiente il livello delle conoscenze e competenze dello studente, esprimerà un giudizio di idoneità, che consentirà l'iscrizione al Corso di Laurea Magistrale

Specifica CFU: Le attività formative sono costituite da corsi di lezioni teoriche,

esercitazioni in aula, laboratorio, tirocini.

Per i corsi costituiti solo da lezioni teoriche ogni CFU corrisponde a 8 ore di didattica frontale e 17 ore di studio individuale. Per i corsi costituiti da lezioni teoriche ed esercitazioni in aula ogni CFU corrisponde a 10 ore di lezione e 15 ore di studio individuale. Per i corsi costituiti da esercitazioni in laboratorio con lezioni di introduzione alle esercitazioni ogni CFU corrisponde a 15 ore di lezione (ripartite fra didattica frontale ed esercitazioni in laboratorio) e 10 ore di studio individuale.

Modalità determinazione voto di Laurea: Il curriculum, il lavoro di tesi e l'esame di laurea concorreranno alla formazione del voto di laurea come segue:

A) si ricava la base di partenza dalla media pesata (sulla base dei CFU) dei voti ottenuti negli esami del corso, si esprime in centodecimi e si arrotonda al numero intero più vicino (a quello superiore nel caso di valore semi-intero);

B) la commissione di laurea valuta il lavoro di tesi e l'esame di laurea con un voto da 6 a 11 e tale punteggio si addiziona al punteggio di base ottenuto al punto A.

È facoltà del Relatore o del Presidente della Commissione di Laurea proporre, nel caso in cui il candidato abbia un punteggio di base non inferiore a 103 e raggiunga la valutazione finale di 110/110, l'assegnazione della lode, in conseguenza del curriculum particolarmente brillante del candidato.

Attività di ricerca rilevante: I docenti del Corso di Laurea Magistrale in Chimica afferiscono in larga maggioranza al Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale. Le principali aree di ricerca sono: Settori CHIM/01 e CHIM/12: Metodologie analitiche strumentali per la caratterizzazione di materiali nel campo ambientale, agro-alimentare, clinico, biotecnologico e dei beni culturali. Procedure innovative basate su cromatografia, spettrometria di massa e chemiometria per l'identificazione dei materiali organici in micro-campioni nel settore dei Beni Culturali e studio dei processi di degrado. Metodologie per la caratterizzazione del profilo metabolico in piante normali e geneticamente modificate (GMP). PNR in Antartide. Procedure per il monitoraggio e controllo della contaminazione ambientale. Progettazione e validazione di biosensori optoelettronici e chemoelettronici. Aspetti cinetici e termodinamici delle reazioni degli acidi nucleici con intercalatori; valutazione dell'impatto sulla salute di nanoparticelle metalliche. Ultrafiltrazione per il recupero di metalli nocivi e preziosi. Settore CHIM/02: Termodinamica di miscele liquide: misure sperimentali e sviluppo di relazioni previsionali. Studio della micellizzazione in soluzione acquosa. Sistemi artificiali per il trasporto di ossigeno. Fotoreazioni organiche e in mezzi chirali con uso di luce polarizzata circolarmente. Spettroscopia di assorbimento, fluorescenza e diffusione da matrici solide. Nuove tecniche NMR, modellistica e simulazione della struttura e dinamica di cristalli liquidi. Teoria e simulazione di processi molecolari indotti da radiazione intensa. Teoria e simulazione di reazioni fotochimiche. Fotochimica supramolecolare e materiali fotomodulabili Fotochimica dell'atmosfera. Modelli teorici delle proprietà di nanomateriali e di dimensioni molecolari. Settore CHIM/03: Sintesi di derivati alchilcarbammici e studio comparativo della loro struttura e reattività. Studio della reattività di leganti metallocoordinati: reazioni di sostituzione o di attacco ai leganti e loro implicazioni in catalisi ed in sintesi metallo-assistite di composti organici. Sintesi e caratterizzazione strutturale di silicati microporosi analoghi a fasi minerali naturali e studio delle loro proprietà chimico-fisiche. Impiantazione di ioni metallici su superfici di matrici inorganiche. Preparazione di materiali nanostrutturati contenenti cluster metallici alternati a spaziatori organici coniugati. Studio del comportamento ossido-riduttivo di complessi metallici con tecniche elettrochimiche. Settori CHIM/04, CHIM/05 e ING-IND/22: Catalisi con catalizzatori a base di metalli di transizione, ottenimento di molecole per la chimica organica industriale con riferimento ai processi e prodotti per la chimica fine, trasferimento di elettroni; chimica delle macromolecole per la produzione di materiali sia strutturali che funzionali riguardanti compositi e nanocompositi e polimeri per usi speciali e biomateriali, lo sviluppo di processi e materiali ecocompatibili e biorinnovabili, materiali biodegradabili e riciclo delle materie plastiche. Settore CHIM/06:

Sintesi organica stereoselettiva per la preparazione di sostanze chirali, con applicazioni in campo biomedico/farmaceutico e agroalimentare. Sviluppo e studio di nuovi catalizzatori e nuovi metodi di eterogeneizzazione. Sviluppo di nuove metodologie sintetiche con composti organometallici. Immobilizzazione di enzimi su supporti solidi per la preparazione di intermedi chimici chirali. Stereochimica e determinazione quali-quantitativa di composti e addotti organici, organometallici e bioorganici cor tecniche spettroscopiche. Impiego di vapori metallici e attivazione dei metalli per la catalisi omogenea ed eterogenea. Applicazioni delle microonde in reazioni organiche. Sintesi di composti naturali analoghi con attività antitumorale e di

semiochimici per insetti. Sintesi di sostanze eteroaromatiche di potenziale interesse farmacologico con reazioni catalitiche di arilazione

Rapporto con il mondo del lavoro: Il tirocinio di tesi, per gli studenti che scelgono di svolgerlo presso aziende o enti esterni all'università, è un'ottima introduzione ad attività lavorative proprie del laureato magistrale in chimica. Importanti studi e rilevazioni di istituti accreditati (Federchimica, Istat, Unioncamere, Alma Laurea), sottolineano l'interesse del settore produttivo e le buone prospettive professionali offerte dal settore chimico industriale. Il progetto Stella mostra che, a distanza di un anno dal conseguimento del titolo, la grande maggioranza dei laureati a Pisa ha un impiego nel settore chimico o prosegue gli studi in corsi di dottorato.

## **Curriculum: Curriculum Chimico Inorganico**

Primo	anno	163	CFII)
FIIIIO	allio	เอง	CFUI

## Chimica Analitica III (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Chimica Analitica III	6	CHIM/01	Caratterizzanti

## Chimica Inorganica II. (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Chimica Inorganica II	6	CHIM/03	Caratterizzanti

## Chimica Inorganica III (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Chimica Inorganica III	6	CHIM/03	Caratterizzanti

## Chimica Organica III con esercitazioni in aula (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Chimica Organica III con esercitazioni in aula	6	CHIM/06	Caratterizzanti

## Laboratorio di Chimica Inorganica II (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Laboratorio di Chimica Inorganica II	6	CHIM/03	Caratterizzanti

## Materiali Inorganici (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Materiali Inorganici	6	CHIM/03	Caratterizzanti

## Catalisi (3 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Catalisi	3	CHIM/03	Affini o integrative

## Metallorganica (9 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Chimica Metallorganica di base	6	CHIM/03	Affini o integrative
Chimica dei Composti Contenenti Legami Metallo-Metallo	3	CHIM/03	Affini o integrative

## Gruppo: GR3 ( 6 CFU)

Descrizione	Tipologia	Ambito				
Rosa di attività del SSD CHIM/02 per i curricula Chimico Analitico, Chimico Inorganico e Chimico Organico	Affini o integrative					
Note: Un corso a scelta tra i seguenti: Chimica Fisica Biologica Chimica Quantistica e Modellistica Molecolare Metodi Spettroscopici Avanzati						

## Libera scelta (9 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Libera scelta	9	NN	Altre attività - scelta libera dello studente

## **Curriculum: Curriculum Chimico Inorganico**

## Secondo anno (57 CFU)

## Laboratorio di Tecniche Chimiche Avanzate (9 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Laboratorio di tecniche chimiche avanzate	9	CHIM/03	Affini o integrative

## Gruppo: GR2 ( 6 CFU)

Descrizione	Tipologia	Ambito			
Rosa di attività caratterizzanti di discipline chimiche industriali	Affini o integrative				
Note: Un corso a scelta tra i seguenti: Biotecnologie Industriali Chimica Macromolecolare Industriale					

## Tesi e prova finale (42 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Tesi e prova finale	39	NN	Altre attività - prova finale
Altre conoscenze utili per l'inserimento nel mondo del lavoro	3	NN	Altre attività - Altre conoscenze utili per l'inserimento nel mondo del lavoro

## **Curriculum: Curriculum Chimico Analitico**

## Primo anno (57 CFU)

## Chimica Analitica III (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Chimica Analitica III	6	CHIM/01	Caratterizzanti

## Chimica Inorganica II. (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Chimica Inorganica II	6	CHIM/03	Caratterizzanti

## Chimica Organica III con esercitazioni in aula (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Chimica Organica III con esercitazioni in aula	6	CHIM/06	Caratterizzanti

## Laboratorio di Chimica Analitica III (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Laboratorio di Chimica Analitica III	6	CHIM/01	Caratterizzanti

## Chimica Analitica dei Beni Culturali (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Chimica Analitica dei Beni Culturali A	3	CHIM/01	Affini o integrative
Chimica Analitica dei Beni Culturali B	3	CHIM/01	Affini o integrative

## Chimica Analitica IV (6 CFU)

		CFU	SSD	Tipologia
Ch	nimica Analitica IV	6	CHIM/01	Affini o integrative

## Gruppo: GR2 ( 6 CFU)

Descrizione	Tipologia	Ambito			
Rosa di attività caratterizzanti di discipline chimiche industriali	Affini o integrative				
Note: Un corso a scelta tra i seguenti: Biotecnologie Industriali Chimica Macromolecolare Industriale					

## Gruppo: GR3 ( 6 CFU)

Descrizione	Tipologia	Ambito		
Rosa di attività del SSD CHIM/02 per i curricula Chimico Analitico, Chimico Inorganico e Chimico Organico	Affini o integrative			
Note: Un corso a scelta tra i sequenti: Chimica Fisica Biologica Chimica Quantistica e Modellistica Molecolare Metodi Spettroscopici Avanzati				

## Libera scelta (9 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Libera scelta	9	NN	Altre attività - scelta libera dello studente

## **Curriculum: Curriculum Chimico Analitico**

## Secondo anno (63 CFU)

## Chimica Analitica V (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Chimica Analitica V	6	CHIM/01	Caratterizzanti

## Laboratorio di Chimica Analitica V (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Laboratorio di Chmica Analitica V	6	CHIM/01	Caratterizzanti

## Laboratorio di Tecniche Chimiche Avanzate (9 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Laboratorio di tecniche chimiche avanzate	9	CHIM/03	Affini o integrative

## Tesi e prova finale (42 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Tesi e prova finale	39	NN	Altre attività - prova finale
Altre conoscenze utili per l'inserimento nel mondo del lavoro	3	NN	Altre attività - Altre conoscenze utili per l'inserimento nel mondo del lavoro

## **Curriculum: Curriculum Chimico Organico**

## Primo anno (54 CFU)

## Chimica Analitica III (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Chimica Analitica III	6	CHIM/01	Caratterizzanti

## Chimica Inorganica II. (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Chimica Inorganica II	6	CHIM/03	Caratterizzanti

## Chimica Organica III (9 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Approccio Retrosintetico alla Sintesi Organica	3	CHIM/06	Caratterizzanti
Chimca Organica III con esercitazioni in aula	6	CHIM/06	Caratterizzanti

## Stereochimica (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Stereochimica	6	CHIM/06	Caratterizzanti

## Laboratorio di Chimica Organica III (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Laboratorio di Chimica Organica III	6	CHIM/06	Affini o integrative

### Sostanze Organiche Naturali di Interesse Biologico e Applicativo (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Sostanze Organiche Naturali di Interesse Biologico e Applicativo	6	CHIM/06	Affini o integrative

### Gruppo: GR3 ( 6 CFU)

Descrizione	Tipologia	Ambito
Rosa di attività del SSD CHIM/02 per i curricula Chimico Analitico, Chimico Inorganico e Chimico Organico	Affini o integrative	

## Note: Un corso a scelta tra i seguenti: Chimica Fisica Biologica Chimica Quantistica e Modellistica Molecolare Metodi Spettroscopici Avanzati

## Libera scelta (9 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Libera scelta	9	NN	Altre attività - scelta libera dello studente

## **Curriculum: Curriculum Chimico Organico**

## Secondo anno (66 CFU)

## Chimica Organica IV con esercitazioni in aula (9 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Chimica Organica IV con esercitazioni in aula	9	CHIM/06	Caratterizzanti

## Laboratorio di Tecniche Chimiche Avanzate (9 CFU)

		CFU	SSD	Tipologia
Lab	boratorio di tecniche chimiche avanzate	9	CHIM/03	Affini o integrative

## Gruppo: GR2 ( 6 CFU)

Descrizione	Tipologia	Ambito
Rosa di attività caratterizzanti di discipline chimiche industriali	Affini o integrative	

Note: Un corso a scelta tra i seguenti: Biotecnologie Industriali Chimica Macromolecolare Industriale

## Tesi e prova finale (42 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Tesi e prova finale	39	NN	Altre attività - prova finale
Altre conoscenze utili per l'inserimento nel mondo del lavoro	3	NN	Altre attività - Altre conoscenze utili per l'inserimento nel mondo del lavoro

## **Curriculum: Curriculum Chimico Fisico**

### Chimica Analitica III (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Chimica Analitica III	6	CHIM/01	Caratterizzanti

## Chimica Fisica Biologica (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Chimica Fisica Biologica	6	CHIM/02	Caratterizzanti

### Chimica Inorganica II. (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Chimica Inorganica II	6	CHIM/03	Caratterizzanti

## Chimica Organica III con esercitazioni in aula (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Chimica Organica III con esercitazioni in aula	6	CHIM/06	Caratterizzanti

## Chimica Quantistica e Modellistica Molecolare (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Chimica Quantistica e Modellistica Molecolare	6	CHIM/02	Caratterizzanti

## Metodi Spettroscopici Avanzati (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Metodi Spettroscopici Avanzati	6	CHIM/02	Caratterizzanti

## Termodinamica Statistica (6 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Termodinamica Statistica	6	CHIM/02	Caratterizzanti

## Gruppo: GR1 ( 12 CFU)

Descrizione	Tipologia	Ambito
Rosa di attività affini ed integrative per il curriculum Chimico Fisico	Affini o integrative	

Note: Due corsi a scelta tra i seguenti: Chimica Fisica dello Stato Solido e dei Materiali Chimica Teorica Metodi Matematici della Chimica Fisica Termodinamica delle Soluzioni, delle Soluzioni Organizzate e dei Sistemi Colloidali

### Libera scelta (9 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Libera scelta	9	NN	Altre attività - scelta libera dello studente

## **Curriculum: Curriculum Chimico Fisico**

## Secondo anno (57 CFU)

## Laboratorio di Tecniche Chimiche Avanzate (9 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Laboratorio di tecniche chimiche avanzate	9	CHIM/03	Affini o integrative

## Gruppo: GR2 ( 6 CFU)

Descrizione	Tipologia	Ambito					
Rosa di attività caratterizzanti di discipline chimiche industriali	Affini o integrative						
Note: Un corso a scelta tra i seguenti: Riotecnologie Industriali Chimica Macromolecolare Industriale							

## Tesi e prova finale (42 CFU)

	CFU	SSD	Tipologia
Tesi e prova finale	39	NN	Altre attività - prova finale
Altre conoscenze utili per l'inserimento nel mondo del lavoro	3	NN	Altre attività - Altre conoscenze utili per l'inserimento nel mondo del lavoro

## Gruppi per attività a scelta nel CDS Chimica

## Gruppo GR1 (12 CFU)

Descrizione: Rosa di attività affini ed integrative per il curriculum Chimico Fisico

Tipologia: Affini o integrative

Note:

Due corsi a scelta tra i seguenti:

Chimica Fisica dello Stato Solido e dei Materiali

Chimica Teorica

Metodi Matematici della Chimica Fisica

Termodinamica delle Soluzioni, delle Soluzioni Organizzate e dei Sistemi Colloidali

### Attività contenute nel gruppo

### Chimica fisica dello stato solido e dei materiali (6 CFU)

Modulo	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica fisica dello stato solido e dei materiali	6	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Affini o integrative	lezioni frontali

### Chimica teorica (6 CFU)

Modulo	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica teorica	6	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Affini o integrative	lezioni frontali

### Metodi matematici della Chimica Fisica (6 CFU)

Modulo	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Laboratorio di calcolo	3	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Affini o integrative	lezioni frontali+laboratorio
Metodi matematici	3	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Affini o integrative	lezioni frontali + esercitazioni

## Termodinamica delle soluzioni, delle soluzioni organizzate e dei sistemi colloidali (6 CFU)

Modulo	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Termodinamica delle soluzioni, delle soluzioni organizzate e dei sistemi colloidali	6	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Affini o integrative	lezioni frontali + esercitazioni

## Gruppo GR2 (6 CFU)

Descrizione: Rosa di attività caratterizzanti di discipline chimiche industriali

Tipologia: Affini o integrative

Note:

Un corso a scelta tra i seguenti:

Biotecnologie Industriali

Chimica Macromolecolare Industriale

## Attività contenute nel gruppo

## Biotecnologie Industriali (6 CFU)

Modulo	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Biotecnologie Industriali	-	CHIM/04 CHIMICA INDUSTRIALE	Caratterizzanti	lezioni frontali

## Chimica Macromolecolare Industriale (6 CFU)

Modulo	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica Macromolecolare Industriale	_	CHIM/04 CHIMICA INDUSTRIALE	Caratterizzanti	lezioni frontali

### Gruppo GR3 (6 CFU)

Descrizione: Rosa di attività del SSD CHIM/02 per i curricula Chimico Analitico, Chimico Inorganico e Chimico Organico

Tipologia: Affini o integrative

Note:

Un corso a scelta tra i seguenti:



Chimica Fisica Biologica Chimica Quantistica e Modellistica Molecolare Metodi Spettroscopici Avanzati

## Attività contenute nel gruppo

## Chimica Fisica Biologica (6 CFU)

Modulo	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica Fisica Biologica	6	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Caratterizzanti	lezioni frontali

## Chimica Quantistica e Modellistica Molecolare (6 CFU)

Modulo	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica Quantistica e Modellistica Molecolare	6	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Caratterizzanti	lezioni frontali + esercitazioni

## Metodi Spettroscopici Avanzati (6 CFU)

Modulo	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Metodi Spettroscopici Avanzati	6	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Caratterizzanti	lezioni frontali + esercitazioni

## Attività formative definite nel CDS Chimica

### Biotecnologie Industriali (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Industrial Biotechnologies

Obiettivi formativi: L'insegnamento si propone di fornire allo studente un'approfondita conoscenza degli strumenti biotecnologici industriali di base quali i processi di fermentazione industriale e bioconversione, mettendo in risalto le potenzialità applicative dei microorganismi nei processi volti alla produzione industriale di metaboliti e biomassa. Il programma sarà incentrato sulle modalità operative di conduzione dei bioprocessi, sui modelli cinetici e sulle basi metaboliche della formazione dei prodotti. Saranno quindi descritti alcuni processi fermentativi industriali e le applicazioni in ambito ambientale, biomedico ed alimentare dei prodotti.

Obiettivi formativi in Inglese: Aim of the course is to provide a deep knowledge of the fundamental biotechnological tools such as industrial fermentation and bioconversion, highlighting the importance of applying micro-organisms for the industrial production of metabolites and biomass. The program will focus on the procedures for bioprocess development, the kinetic models and the metabolic basis for product formation. Industrial fermentation processes will be described together with the employments of the products for environmental, biomedical and food applications.

**CFU**: 6

Reteirabilità: 1

Propedeuticità: La frequenza del corso non è obbligatoria, ma raccomandata.

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

#### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Biotecnologie Industriali	6	CHIM/04 CHIMICA INDUSTRIALE	Caratterizzanti	lezioni frontali

### Biotrasformazioni in Chimica Organica (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Biotransformations in Organic Chemistry

Obiettivi formativi: L'obiettivo del corso è quello di illustrare l'uso dégli enzimi come catalizzatori in sintesi organica. Dopo una breve introduzione sugli aspetti generali (proprietà, meccanismo, cinetica) saranno presentate le biotrasformazioni catalizzate dalle principali classi di enzimi. Verranno esaminate importanti tecniche sperimentali quali l'immobilizzazione di enzimi e l'uso di enzimi in solvente organico. Saranno inoltre prese in esame alcune applicazioni della biocatalisi per la sintesi su larga scala di intermedi di interesse farmaceutico.

Obiettivi formativi in Inglese: The course focuses on the use of enzymes as catalysts in organic synthesis. Biotransformations catalyzed by the main classes of enzymes are illustrated. A condensed introduction on enzyme properties, mechanistic and kinetic aspects is also provided. The course approaches some issues related to special techniques in the application of biocatalysis such as immobilization and use in of organic solvents. Some selected examples of existing applications on large scale synthesis of drugs are described.

CFU: 3 Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Biotrasformazioni in Chimica Organica	3	CHIM/06 CHIMICA ORGANICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

### Catalisi (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Catalysis

Obiettivi formativi: Il Corso di Catalisi si propone di illustrare i concetti di base della catalisi eterogenea e omogenea. Saranno prese in esame le principali classi di catalizzatori evidenziandone le proprietà in funzione delle caratteristiche delle reazioni. Partendo dall'esame di alcuni processi industriali che utilizzano catalizzatori sia omogenei che eterogenei, questo Corso mostrerà i problemi coinvolti e come questi sono stati risolti.

Obiettivi formativi in Inglese: The Course is concerned with an deepening of the basic principles for the understanding of the phenomenon the heterogeneous and homogeneous catalysis. It will be illustrated the main classes of the catalysts, showing the properties as a function of the main features of the reactions. The Course of Catalysis surveys the field of homogeneous and heterogeneos catalysis, and, by highlighting a number of industrial processes, shows how one should think about the problems involved, and how they have been answered.

**CFU:** 3

Reteirabilità: 1

**Propedeuticità:** Per seguire il corso sono necessarie le conoscenze di base della chimica inorganica e organica, impartite nei corsi di laurea triennale in Chimica o in Chimica per l'Industria e l'Ambiente.

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Catalisi	3		Affini o integrative	lezioni frontali



Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
		CHIM/03 CHIMICA GENERALE E INORGANICA		

### Catalizzatori nanostrutturati in sintesi organica (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Nanocatalysts in organic synthesis

Obiettivi formativi: Il corso si propone di fornire allo studente conoscenze sulle metodologie di preparazione di catalizzatori nanostrutturati mono- e bimetallici e sulle loro principali applicazioni alla sintesi organica ed a processi di interesse industriale Obiettivi formativi in Inglese: To acquire a background on the fundamental methodologies for the preparation of mono- and bimetallic nanoparticles and on their application as catalytic precursors in organic synthesis and industrial reactions

Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Catalizzatori nanostrutturati in sintesi organica	3	CHIM/03 CHIMICA GENERALE E INORGANICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

### Chemiometria (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Chemometrics

Obiettivi formativi: "Fornire agli studenti una conoscenza di base dei metodi statistici multivariati per l'analisi di dati chimici. Tramite lezioni teoriche, esercitazioni in aula di informatica ed esempi, gli studenti acquisiranno familiarità con i più utilizzati metodi di pattern analysis (analisi delle componenti principali, analisi dei cluster) e disegno sperimentale, nell'ottica delle possibili applicazioni in chimica analitica.

Obiettivi formativi in Inglese: "The course gives a base knowledge of multivariate statistical methods for the analysis of chemical data. By mean of theorethical lessons, practical exercise in informatic laboratory and examples, students will get to familiarise with the more commonly adopted methiods of pattern analysis (principal component analysis, cluster analysis) and experimental design, with particular attention to the applications in analytical chemistry.

CFU: 3 Reteirabilità: 1

Propedeuticità: No Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chemiometria	3	CHIM/01 CHIMICA ANALITICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

## Chimica analitica clinica (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Clinical analytical chemistry

Obiettivi formativi: Introduzione all'analisi di campioni biologici d'interesse clinico. Sviluppo di una procedura analitica: matrici d'indagine; prelievo e pre-trattamento del campione.

Validazione della metodologia analitica. Controllo ed assicurazione della qualità dei dati analitici. Tecniche strumentali.

Applicazioni: metodi analitici per la caratterizzazione chimica di campioni di sangue, espirato e saliva e relativi esempi riferiti a specifiche patologie.

CFU: 3 Reteirabilità: 1

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica analitica clinica	3	CHIM/01 CHIMICA ANALITICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

## Chimica Analitica dei Beni Culturali (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Cultural Heritage Analytical Chemistry

Obiettivi formativi: Chimica Analitica dei Beni Culturali A. Questo corso intende fornire allo studente le conoscenze relative alla natura dei materiali che si possono incontrare nei beni culturali, con attenzione ai relativi processi di invecchiamento e

degrado. Il corso pone poi l'attenzione a metodi indagine non invasivi e non distruttivi per l'identificazione e localizzazione dei materiali organici e inorganici in un dipinto e all'interno degli strati pittorici. Si approfondisce la conoscenza di tecniche analitiche spettroscopiche per la caratterizzazione di sistemi complessi, che vanno dalla microscopia ottica a quella elettronica, colore e colorimetria, spettrofotometria IR e tecniche di indagine che impiegano i raggi X. Al termine del corso lo studente dovrà essere in grado di operare una scelta ragionata della tecnica analitica appropriata per la caratterizzazione spettroscopica di manufatti artistici, e in particolare pittorici, sulla base della natura dell'oggetto di indagine e del tipo di informazione richiesta.

Chimica Analitica dei Beni Culturali B. In questo corso lo studente viene introdotto all'applicazione di tecniche molecolari per la caratterizzazione di materiali organici in micro campioni pittorici presenti in miscele complesse e la comprensione del loro stato di degrado. Prevalentemente verrà posta l'attenzione su tecniche di indagine e procedure analitiche basate sulla spettrometria di massa e cromatografia, tra cui SIMS, GC-MS e Py-GC-MS, reazioni termicamente assistite, e tecniche di proteomica basate su HPLC-MS e MALDI-MS. Al termine del corso lo studente dovrà essere in grado di operare una scelta ragionata della tecnica analitica appropriata per la caratterizzazione di materiali organici in funzione della natura dell'oggetto di indagine, della tipologia di campione e alla natura del problema analitico.

Obiettivi formativi in Inglese: Analytical chemistry for Cultural Heritage A. This course aims at providing the students with knowledge on the nature of the materials present in cultural heritage objects, and on their relative processes of aging and decay. The course focuses on non-invasive and non-destructive methods for the identification and localization of organic and inorganic materials in a painting and within the paint layers. It deepens the knowledge of spectroscopic analytical techniques for the characterization of complex systems, ranging from optical to electronic microscopy, color and colorimetry, IR spectrophotometry and investigation techniques based on X-rays. At the end of the course the student will be able to make a reasoned choice of the appropriate analytical technique to be used for the spectroscopic characterization of artifacts, and in particular paintings, based on the nature of the art object and the type of information requested.

Analytical chemistry for Cultural Heritage B. In this course the student is introduced to the application of molecular techniques for the characterization of organic materials in micro samples from paintings, to identify them in complex mixtures and to understand their degradation. Investigation techniques and analytical procedures based on mass spectrometry and chromatography will be discussed, including SIMS, Py-GC-MS and GC-MS, thermally assisted reactions, and proteomic techniques based on HPLC-MS and MALDI-MS. At the end of the course the student will be able to make a reasoned choice of the appropriate analytical technique to be used for the characterization of organic materials depending on the nature of the art object, the sample type, and the nature of the analytical problem.

**CFU**: 6

Reteirabilità: 1

**Propedeuticità:** Nessun obbligo di frequenza **Modalità di verifica finale:** Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica Analitica dei Beni Culturali A	3	CHIM/01 CHIMICA ANALITICA	Affini o integrative	lezioni frontali
Chimica Analitica dei Beni Culturali B	3	CHIM/01 CHIMICA ANALITICA	Affini o integrative	lezioni frontali

## Chimica Analitica III (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Analytical Chemistry III

Obiettivi formativi: "Il corso di Chimica Analitica III si propone di approfondire gli aspetti più critici della chimica analitica applicata alla caratterizzazione di sistemi reali. Il corso affronterà tutte le fasi di una procedura analitica (dalla preparazione del campione alla valutazione del dato finale), compresi i metodi per il controllo e l'assicurazione della qualità dei dati analitici, ed approfondirà le modalità di approccio all'analisi di matrici reali complesse, proponendo in particolare alcuni esempi applicativi in campo ambientale, alimentare, biomedico e dei beni culturali. Infine, saranno trattati alcuni aspetti legati alla chimica analitica di processo.

Alla fine del corso lo studente dovrà essere in grado di sviluppare una procedura analitica, determinare le sue prestazioni e valutare criticamente i risultati sperimentali

valutare criticamente i risultati sperimentali.

Obiettivi formativi in Inglese: "The course of Analytical Chemistry III aims to examine the most critical aspects of analytical chemistry applied to the characterization of real systems. The course will cover all the phases of an analytical procedure (from sample preparation to final evaluation of the data), including methods for quality control and quality assurance of analytical data, in particular addressing some analytical problems in the environmental, food, biomedical and cultural heritage fields. Finally, some aspects of the process analytical chemistry will be presented.

At the end of the course students will be able to develop an analytical procedure, to determine the most important figures of merit and to critically evaluate the experimental results.

**CFU**: 6

Reteirabilità: 1

Propedeuticità: Nessun obbligo di frequenza

Modalità di verifica finale: La valutazione risulterà da un esame orale, nel quale gli studenti dovranno dimostrare di avere raggiunto gli obiettivi formativi sopra definiti.

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica Analitica III	6	CHIM/01 CHIMICA ANALITICA	Caratterizzanti	lezioni frontali

### Chimica Analitica IV (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Analytical Chemistry IV



Obiettivi formativi: Lo scopo del Corso è fornire allo studente le conoscenze di base relative alle tecniche strumentali più importanti per lo studio e la caratterizzazione di interfasi e superfici, con particolare riguardo a: tecniche di spettroscopia laser (LIBS, LIF, Raman), tecniche a raggi X, spettroscopia elettronica per l'analisi chimica (ESCA), spettrometria di massa con sorgente a Glow Discharge (GDMS) e con ionizzazione secondaria (SIMS).

Inoltre lo studente sarà introdotto a tecniche moderne di spettrometria di massa come Inductively coupled plasma mass spectrometry (ICP-MS) combinate a sistemi in linea per la separazione di analiti (per esempio cromatografia liquida). La combinazione della tecnica Laser Ablation con ICPMS sarà anche considerata durante il corso.

A complemento, verranno anche trattate tecniche spettroscopiche basate su sorgenti di luce a sincrotrone per la caratterizzazione di campioni di diversa origine.

Obiettivi formativi in Inglese: The goal of the course is to provide the student with basic knowledge of the most relevant instrumental techniques for the characterization of interfaces and surfaces. In particular, laser spectroscopy techniques (LIBS, LIF, Raman), X-ray spectroscopy, electronic spectroscopy for chemical analysis (ESCA), glow discharge mass spectrometry (GDMS) and secondary ion mass spectrometry (SIMS) will be considered.

The student will be also introduced to modern mass spectrometric techniques as inductively coupled mass spectrometry (ICP-MS) combined with on-line systems for chemical separation (as for instance liquid chromatography). The combination of Laser ablation with ICP-MS will be also treated.

As a complement, spectroscopic techniques based on synchrotron light sources for the characterization of samples of different origin are included.

CFU: 6 Reteirabilità: 1

**Propedeuticità:** Nessun obbligo di frequenza **Modalità di verifica finale:** Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

#### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica Analitica IV	6	CHIM/01 CHIMICA ANALITICA	Affini o integrative	lezioni frontali

### Chimica Analitica Spettroscopica II (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Analytical Chemistry Spectroscopy II

Obiettivi formativi: "În questo corso si sviluppa il concetto di simmetria nell'ambito della teoria dei gruppi per l'interpretazione dello spettro molecolare. Saranno inoltre esaminati importanti accessori che possono essere assemblati ad uno spettrofotometro FT-IR quali: il microscopio e vari altri accessori di riflessione. Infine si darà anche una introduzione alla Spettroscopia Fotoacustica.

**Objectivi formativi in Inglese:** "This course is aimed to develop the geometric definition of symmetry in the group theory for the interpretation of molecular spectra. Applications of FT-IR Microspectroscopy, Attenuated Total Reflectance, Multiple Internal Reflection and introduction at the Photoacustic Spectroscopy are presented.

Reteirabilità: 1

**Propedeuticità:** Nessun obbligo di frequenza **Modalità di verifica finale:** Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica Analitica Spettroscopica	3	CHIM/01 CHIMICA ANALITICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

## Chimica Analitica V (6 CFU)

**Denominazione in Inglese:** Analytical Chemistry V

Obiettivi formativi: Spettroscopia atomica e spettrometria di massa per l'analisi elementare a livello di tracce ed ultratracce. Cenni sugli aspetti fondamentali delle principali tecniche spettroscopiche per analisi elementare a livello di tracce: spettroscopia atomica di assorbimento (AAS), emissione(OES) e fluorescenza(AFS), spettrometria di massa (ICP-MS e GC-MS) e descrizione schematica della strumentazione impiegata. Metodi di introduzione del campione: atomizzatori principali e loro limiti. Metodi di derivatizzazione degli analiti a composti volatili (metodi chimici, fotochimici, elettrochimici e sono chimici) quale metodo di introduzione del campione. Metodi chimici in fase acquosa (CVG): reattivi usati, sistemi di reazione, metodi di manipolazione dei derivati volatili. Meccanismi di generazione di specie volatili mediante reazione con borano complessi in fase acquosa. Dispositivi particolari dedicati alla atomizzazione di composti volatili (idruri, metallo alchili, ecc) per AAS e AFS e meccanismi di atomizzazione. Interferenze nelle tecniche di generazione di specie volatili. Interferenze in CVG: in fase liquida o di generazione, di trasporto e di atomizzazione. Meccanismi di interferenza. Controllo e rimozione di effetti interferenti.

Alchilazione con sali di trialchilossonio per la generazione di derivati volatili di specie anioniche in fase acquosa (alogenuri, nitrati, nitriti, solfuri, cianuri e tiocianati) e loro determinazione a livello di ultratracce mediante GC-MS. Applicazioni della CVG-AAS, CVG-AFS, CVG-ICPMS e CVG-GCMS a problematiche di tipo ambientale, biomedico, tossicologico e nella caratterizzazione dei materiali. Determinazione della speciazione elementare mediante generazione selettiva di composti volatili, mediante interfacciamento a metodi cromatografici. Validazione dei metodi analitici. Campioni certificati di riferimento.

### Obiettivi formativi in Inglese:

Atomic spectrometry and mass spectrometry for trace and ultra trace element analysis. Briefs on fundamental aspects of the main spectrometric techniques for trace element analysis: atomic absorption (AAS), atomic emission (OES), atomic fluorescence (AFS), spettrometria di massa (ICP-MS e GC-MS) and schematic description of the relevant instrumental setups. Sample introduction techniques: atomization devices and their principal limitations. Conversion of analytical species to volatile derivatives (chemical, photochemical, electrochemical and sonochemical derivatization) as sample introduction method. Aqueous phase chemical vapour generation (CVG): reagents, reaction systems, manipulation strategies of volatile



derivatives. Mechanism of hydride generation by aqueous boranes. Specific devices for the atomization of volatile species (hydrides, alkylmetals, etc) in AAS e AFS and atomization mechanisms. Interferences in CVG: liquid-phase or generation interferences, transport interferences, atomization interferences. Control and removal of interference effects.

Aqueous phase alkylation of anionic species by trialkyloxonium salts (halides, nitrite, nitrate, sulphide, cyanide, thiocyanate)

for ultratrace analysis by GC-MS.

Applications of CVG-AAS, CVG-AFS, CVG-ICPMS e CVG-GCMS to analysis in different field: environmental, biomedical,

toxicological and materials. Validation of analytical methods. Certified reference materials. *CFU*: 6

Reteirabilità: 1

Propedeuticità: Chimica Analitica III e Chimica Analitica IV. Nessun obbligo di freguenza

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

#### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica Analitica V	6	CHIM/01 CHIMICA ANALITICA	Caratterizzanti	lezioni frontali

### Chimica Bioanalitica (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Analytical Biochemistry

Obiettivi formativi: La fluorescenza,. Stati eccitati e loro decadimenti, radiativi e non radiativi. Diagramma di Jablonski. Caratteristiche dell'emissione. Spettri di emissione, di eccitazione e di assorbimento. Shift di Stokes. Misura della fluorescenza. Spettrofluorimetro. Relazione tra fluorescenza e concentrazione. Effetto di filtro interno. Scelta della lunghezza d'onda di eccitazione e di emissione. Aspetti dinamici della fluorescenza. Velocità dei decadimenti. . Resa quantica in termini di costanti di velocità di decadimento e sua misura. Misura dei tempi di vita. Metodologie basate sul dominio dei tempi. Metodologie basate sul dominio delle frequenze. Uso dei .tempi di vita per scopi strutturali. Il quencing di fluorescenza. Quencing statico e quencing dinamico. Equazione di Stern-Volmer. Esempi di quencing e sue applicazioni. Il FRET (fluorescence resonance energy tranfer). Donatori e accettori di energia, sovrapposizione di spettri. La teoria di Foerster. Relazione tra la costante cinetica di decadimento di fluorescenza e la distanza tra donatore e accettore. Efficienza del FRET. Efficienza e rese quantiche. La distanza di Foerster. Il FRET in biofisica e in chimica bioanalitica. Il "sensing" . di fluorescenza. Uso di sensori fluorescenti nella chimica bioanalitica. Sensori per esplosivi. FCS Fluorescence correlation spectroscopy). Osservazione e analisi di singole molecole tramite la spettroscopia di correlazione di fluorescenza. Fluttuazioni di fluorescenza in soluzioni estremamente diluite (< 10-9 M). Il femtovolume. Descrizione e uso di uno strumento per FCS. Costruzione della curva di correlazione a partire dalle fluttuazioni di fluorescenza. Sistemi a un componente: determinazione del coefficiente di diffusione, della concentrazione e del tempo di vita di tripletto. Sistemi a due componenti che reagiscono tra loro. Esempi. La chemiluminescenza e le sue applicazioni in chimica analitica

Elettroforesi. Grandezze caratteristiche: campo elettrico, mobilità dell'analita, rapporto carica/volume. Equazioni della velocità di migrazione. Elettroforesi classica. Supporti, tamponi, controllo dell'effetto Joule. Il flusso elettroosmotico. Velocità del flusso elettroosmotico. Tipi di elettroforesi e loro descrizione: Elettroforesi zonale, focalizzazione isoelettrica, isotacoforesi, elettroforesi bidimensionale, immunoelettroforesi, elettroforesi rocket. Separazione di proteine. Uso di soluzioni micellari (sodiododecilsolfato). Separazione di acidi nucleici. Elettroforesi su gel di agarosio e di polacrilammide. Elettroforesi capillare. Trattamento dei capillari. Controllo e/o eliminazione del flusso elettroosmotico. Sensibilità e risoluzione dell'elettroforesi capillare.

Obiettivi formativi in Inglese: Fluorescence. Excited states and their radiative and non-radiativedecays. Jablonsky diagram. Emission properties. Emission and excitation and absorption spectra. The Stokes shift. Fluorescence measuremants. The spectrofluorometer. Concentration dependence of fluorescence. Inner filter effect. Choice of excitation and emission wavelengths. Dynamic aspects of fluorescence. The decay rate. The quantum yeld from decay rate. Life-time measurements. Methods based on time-domain and on frequency domain. Life-time and structure. The quenching of fluorescence. Static and dinamic quenching. The Stern-Volmer equation. Applications of quenching. FRET (fluorescence resonance energy tranfer). Donors and acceptors of energy. Spectra overlapping. The Foerster theory. Decay rate constants and donor-acceptor distance. The FRET efficiency. Efficiency and quantum yelds. The Foerster distance. FRET in biophysics an analytical biochemistry. The fluorescence sensing. Use of fluorescence sensors in bioanalytical chemistry. Sensors for explosives. FCS Fluorescence correlation spectroscopy). Fluorescence fluctuations in extremely diluted solutions (<10-9M). The femtovolume. Description and used of a FCS apparatus.Building of the correlation curve from fluorescence fluctuations. One-component systems: evaluation diffusion coefficient, concentration, end triplet life-time. Two-component systems. Examples of FCS application. The chemiluminescence and its use in analytical chemistry.

Electrophoresis. Properties. Electric field, analyte mobility, charge/volume ratio. Migration rate equations. Classical electrophoresis. Support media. Buffers, Joule effect and its control. The electrosmotic flow and its evaluation. Types of electrophoresis: zonal electrophoresis, isoelectric focalization, isothacoforesis, immunoelectrophoresis, rocket electrophoresis. Separation of proteins. Use of micellar pseudophases (Sodium dodecylsulphate). Nucleic acids separation. Gel electrophoresis (agarose and polyacrylamide). Capillary electrophoresis. Handling of capillaries. Control and/or elimination of the electrosmotic flow. Sensitivity and resolution of capillary electrophoresis.

Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

CFU: 3

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica Bioanalitica	3	CHIM/01 CHIMICA ANALITICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

### Chimica dei Composti di Coordinazione II (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Coordination Chemistry II

Obiettivi formativi: Oli studenti dovranno acquisire una buona conoscenza delle reazioni tipiche dei composti di coordinazione dei metalli di transizione d e degli andamenti osservati, con particolare attenzione a specie contenenti H2, CO, N2, NO, O2, CO2 come leganti.

Programma sintetico: Reattività dei composti di coordinazione. Reazioni di sostituzione, reazioni con trasferimento elettronico tra due centri metallici, reazioni a stampo, reazioni di inserzione, di addizione ossidativa, di attacco a leganti coordinati. Sintesi, caratteristiche e reattività di complessi contenenti H2, CO, N2, NO, O2, CO2 come leganti.

Objectivi formativi in Inglese: The aim of the course is to present the principal reactions which are characteristic of the d metal complexes (compared with other centres) in a systematic way.

The program mainly concerns with the reactivity of the coordination compounds (substitution reactions, electronic exchange reactions, template reactions, insertion and oxidative addition reactions, attacks to coordinated ligands).

Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

#### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica dei Composti di Coordinazione II	3	CHIM/03 CHIMICA GENERALE E INORGANICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

## Chimica Fisica Biologica (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Biophysical Chemistry

Obiettivi formativi: Obiettivi formativi: conoscenza dei metodi e delle tecniche chimico fisiche idonee allo studio di struttura e funzioni delle macromolecole di interesse biologico.

Tecniche chimico fisiche per lo studio della struttura e della conformazione delle macromolecole biologiche. Equilibri e cinetica del legame di leganti alle macromolecole biologiche. Regolazione dell'attività biologica. Transizioni conformazionali e folding reversibile. Equilibri di membrana e trasporto attraverso membrane biologiche.

**Objectivi formativi in Inglese:** Physical chemical techniques for the study of biological structures, function and behaviour. Ligand interaction at equilibrium. Kinetics of ligand interactions. Regulation of biological activity. Conformational equilibria and reversible folding of proteins. Membrane equilibria and transport in biological membranes.

CFU: 6

Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica Fisica Biologica	6	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Caratterizzanti	lezioni frontali

### Chimica fisica dei fluidi (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Physical chemistry of liquids

Obiettivi formativi: Obiettivi formativi:

conoscenza dei principali metodi teorici per lo studio di sistemi in fase fluida.

Contenuti:

Strumenti teorici per lo studio di struttura (teorie della funzione di distribuzione, metodi perturbativi) e dinamica (eq. di Langevin,funzioni di correlazione dipendenti dal tempo,idrodinamica) di fluidi.

Objectivi formativi in Inglese: Theoretical approaches to the fluid state. Structure (distribution function theories, perturbation methods) and dynamics (time dependent correlation functions, Langevin equation, hydrodynamics)

CFU: 3 Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica fisica dei fluidi	3	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

### Chimica Fisica dei Sistemi Dispersi e delle Interfasi (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Physical chemistry of Dispersed Systems and Interfaces

Obiettivi formativi: Il corso si prefigge lo scopo di fornire i concetti chimico fisici su cui si fonda il comportamento dei sistemi colloidali ed i principi necessari per comprendere la fenomenologia di sistemi di interesse industriale ed applicativo in cui la presenza di un'estesa interfase costituisce un aspetto caratterizzante. Saranno approfonditi in particolare gli aspetti termodinamici riguardanti la natura e le proprietà dei sistemi colloidali, delle superfici e delle interfasi. Contenuti

Colloidi. Termodinamica delle superfici, delle interfasi e dell'adsorbimento. Interazioni tra particelle colloidali. Bagnabilità delle superfici. Emulsioni: formazione e stabilità.

Obiettivi formativi in Inglese: The course is aimed to give the physico-chemical concepts grounding the behavior of colloids and the principles necessary to the phenomenological comprehension of systems of industrial as well as applicative interest characterized by a large interface. Particular attention will be paid to the thermodynamic aspects of the nature and properties of colloid dispersions, surfaces, and interfaces.

Nature of colloids. Thermodynamics of surfaces, interfaces, and adsorption. Interactions in dispersed systems. Wetting of surfaces by liquids. Emulsions: formation and stability.

CFU: 3 Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

#### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica Fisica dei Sistemi Dispersi e delle Interfasi	3	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

#### Chimica fisica dello stato solido e dei materiali (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Physical chemistry of the solid state

Obiettivi formativi: Obiettivi formativi: comprensione delle proprieta` chimico-fisiche dei solidi cristallini anche ai fini delle loro utilizzazioni pratiche.

Contenuti:

Struttura cristallina: fondamenti e metodi di indagine sperimentale (diffrazione). Forze di coesione. Dinamiche reticolari: vibrazioni elastiche e modelli di solidi. Proprieta termodinamiche e meccaniche dei solidi. Struttura elettronica: bande e densita degli stati.

Metalli e gas di elettroni. Proprieta` elettriche e magnetiche. Difetti reticolari. Superfici e effetti di interesse chimico.

Obiettivi formativi in Inglese: Contents:

Crystal structure: basic concepts and experimental methods of investigation (diffraction). Cohesion. Lattice dynamics: elastic vibration and model of solids. Mechanical and thermodynamic properties.

Electronic structure: energy bands and density of states. Metals and electron gas. Electric and magnetic properties. Lattice defects. Surfaces and chemistry.

CFU: 6

Reteirabilità: 1

Propedeuticità: Nessun obbligo di frequenza

Modalità di verifica finale: Esame

Lingua ufficiale: Italiano

## Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica fisica dello stato solido e dei materiali	6	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Affini o integrative	lezioni frontali

## Chimica Fisica organica (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Physical organic chemistry

Obiettivi formativi: Contenuti:

Cinetica chimica formale. Il meccanismo di reazione. Usi cinetici e non cinetici degli isotopi. Studio degli intermedi di reazione. Correlazioni tra struttura e reattività. Effetto del solvente. Criteri stereochimici.

Relazioni extra-termodinamiche e loro basi termodinamiche (Hammett, Bronsted, Taft,...). Fenomeni di catalisi: catalisi acida e basica, catalisi chimica e fisica, catalisi enzimatica. Reazioni di addizione, sostituzione e eliminazione. Cenni sulla teoria delle reazioni concertate. Reazioni elettrocicliche, cicloaddizioni, trasposizioni sigmatropiche.

Objettivi formativi in Inglese: Experimental and theoretical aspects of chemical reaction kinetics.

Reaction mechanisms. The use of isotopes in studying a reaction mechanism. Study of reaction intermediates. Reactivity vs. structure correlations. Solvent effect. Stereochemical criteria.

Extrathermodynamic relationships (Hammett, Bronsted, Taft,..).

Catalysis: acid and base catalysis, chemical and physical catalysis, enzymatic catalysis. Addition reactions, substitution reactions and elimination reactions. Theoretical analysis for the concerted reactions

Electrocyclic reactions, Cycloaddition reactions, sigmatropic reactions.

CFU: 3 Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame

Lingua ufficiale: Italiano

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica



Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica Fisica organica	3	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

### Chimica Inorganica II. (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Inorganic Chemistry II

Obiettivi formativi: Introduzione: l'ambiente in cui viviamo: temperatura, pressione, energia. Gli elementi: identità, abbondanza. stabilità. La tabella periodica.

Le forze che tengono insieme gli atomi: il legame covalente, il legame ionico, il legame metallico. Interazioni deboli e forze repulsive.

Le dimensioni delle particelle: i raggi atomici, i raggi covalenti, i raggi ionici, i raggi metallici, i raggi di van der Waals.

Acidi e basi: Brønsted e Lowry, Lux-Flood, definizione basata sul solvente, Lewis, Usanovich. Forza acido-base: confronto tra ammine, affinità protonica e basicità in acqua, acidità degli alogenuri di idrogeno e degli acidi ossigenati in acqua, acidi e basi hard and soft.

Solventi non acquosi: ammoniaca liquida, acido solforico, fluoruro di idrogeno e acidi magici, liquidi ionici.

Reattività in campo inorganico. Le reazioni dei composti di coordinazione. Labilità e inerzia dei complessi. Reazioni di sostituzione. Reazioni di trasferimento elettronico. Reazioni a stampo. Reazioni di attacco al legante coordinato. Reazioni di inserzione. Argomento monografico:

alcuni aspetti della chimica del biossido di carbonio (cenni alla fotosintesi e al ciclo del carbonio, proprietà e comportamento di CO2 in acqua, i complessi del biossido di carbonio, l'anidrasi carbonica). **Obiettivi formativi in Inglese:** The aim of the course is to improve the knowledge about the chemistry of the elements,

**Objectivi formativi in Inglese:** The aim of the course is to improve the knowledge about the chemistry of the elements, relatively to their position in the periodic table, by comparing them and their compounds through examples of different complexity.

The program will deal with: the elements of the groups 1-18 and the f elements; the comparison of the binary halides ECIn, according to their composition; acids and bases; non-aqueous solvents; chains, rings, cages; some topics of bioinorganic chemistry (biogeochemical cycles, O2 reactivity, O2 carriers).

CFU: 6 Reteirabilità: 1

**Propedeuticità:** Nessun obbligo di frequenza. **Modalità di verifica finale:** Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

#### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica Inorganica II	6	CHIM/03 CHIMICA GENERALE E INORGANICA	Caratterizzanti	lezioni frontali

## Chimica Inorganica III (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Inorganic Chemistry III

Obiettivi formativi: Chiarimento ed applicazioni della termodinamica chimica.

Chimica dell'idrogeno. Metodi fotochimici, elettrochimici e chimici per la riduzione dell'acqua. Carbonio fossile come agente riducente, WGSR e metodi per la completa rimozione di CO in miscela con idrogeno per ottenere Fuel Cell grade Hydrogen (FCH). Metodi per immagazzinare l'idrogeno.

CO2 come hydrogen storage material. Idrogenazione della CO2 ad acido formico promossa da catalizzatori eterogenei a base di Au che tollerano il CO. Decomposizione dell'acido formico a CO2 e idrogeno non contaminato da CO. Rimozione e immagazzinamento della CO2.

Lo studente sarà in grado di applicare la termodinamica alle trasformazioni chimiche e conoscerà in dettaglio i metodi per la produzione, affinazione e immagazzinamento dell'idrogeno, le proprietà delle celle a combustibile (Proton Exchange Membrane Fuel Cell PEMFC), la letteratura chimica riguardante la gassificazione del carbone, steam and oxidative reforming delle riserve di carbonio fossile, lo Shift del gas d'acqua, l'idrogenazione della CO2 ad acido formico e i recenti sviluppi della chimica del gas di sintesi.

In laboratorio sarà mostrata la preparazione di miscele gassose sotto pressione in autoclave. Lo studente sarà informato sui rischi associati a questa tecnica.

Obiettivi formativi in Inglese: Maturing and clarification of chemical thermodynamics.

Dihydrogen chemistry. Photochemical, electrochemical and chemical methods for the water reduction. Fossil carbon reducing agent, WGSR and methods for the complete CO removal to FCH. Hydrogen storage and CO2 hydrogen storage material. CO2 hydrogenation to formic acid promoted by CO-tolerating gold catalyst. Formic acid decomposition to CO-free hydrogen and CO2. CO2 capture and storage.

The student who successfully complete the course will be able to apply thermodynamics to chemical transformations. He will know in detail the methods for the production, refining and storage of Fuel Cell grade Hydrogen (FCH). He will be aware of Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC) properties. He will be able to discuss the current chemical literature concerning coal gasification, steam and oxidative reforming of fossil carbon, Water Gas Shift Reaction, CO2 hydrogenation to formic acid and the recent developments in the syngas chemistry.

He will experience the preparation of gas-mixtures under pressure and the handling of high pressure reactors. He will be aware of the hazards associated with these practices.

CFU: 6 Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica Inorganica III	6		Caratterizzanti	lezioni frontali



Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
		CHIM/03 CHIMICA GENERALE E INORGANICA		

### Chimica Macromolecolare Industriale (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Macromolecular Industrial Chemistry

Obiettivi formativi: L'attività formativa intende fornire un'ampia visione dell'industria dei polimeri attuale con l'obiettivo principale di far apprendere i fondamenti chimici alla base della progettazione, della preparazione e dell'applicazione su larga scala industriale dei polimeri

Il corso richiamerà i principi generali della chimica industriale dei polimeri, soprattutto quelli di sintesi, ma anche quelli di origine naturale. Fornirà poi conoscenze più approfondite sulla progettazione molecolare, la sintesi e la caratterizzazione dei polimeri industriali a partire sia dai prodotti della petrolchimica che della chimica fine, che da fonti rinnovabili. Affronterà alcuni aspetti chimici catalitici e meccanicistici della preparazione e del ciclo di vita dei polimeri industriali; di questi esaminerà le principali proprietà chimico-fisiche, in vista dei possibili impieghi.

Lo studente apprenderà i criteri di scelta dei prodotti e dei processi più moderni e vantaggiosi e conoscerà le problematiche connesse con la produzione su scala industriale e il suo impatto socio-economico e ambientale. Saprà inoltre definire correlazioni struttura-reattività e struttura-proprietà dei polimeri industriali in riferimento alle loro prestazioni in particolari settori applicativi.

Obiettivi formativi in Inglese: The course aims at providing a wide understanding of modern polymer industrial chemistry with the principal objective of achieving a good knowledge of the chemical fundamentals of the design, preparation and application of polymers on a large scale.

At the beginning the basic principles will be recalled of the industrial chemistry of polymers, mainly synthetic polymers but natural polymers as well. Later on, special features will be studied in more detail dealing with the molecular design, preparation and characterization of industrial polymers starting from both petrochemicals, fine chemicals and chemicals from renewable resources. Interest will be placed on the catalytic and mechanistic aspects of the synthesis and life cycle of polymers. Attention will also be devoted to analyzing the main physical-chemical properties, in view of possible uses. The student will learn criteria for selection of more actual and profitable products and processes and will know the current problems associated with large scale, industrial production and its social-economical and environmental impact. He/she will be able to define structure-reactivity and structure-property relationships for industrial polymers, in view of their practical performance in specific application areas. **CFU:** 6

Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica Macromolecolare Industriale	6	CHIM/04 CHIMICA INDUSTRIALE	Caratterizzanti	lezioni frontali

## Chimica Nucleare (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Nuclear Chemistry

Diettivi formativi: Il corso si prefigge lo scopo di introdurre lo studente ai concetti base della chimica nucleare, alla chimica e proprietà degli elementi radioattivi e ad argomenti di importanza pratica strettamente legati. Si parlerà di stabilità dei nuclei atomici, dei loro tipi di decadimento radioattivo e di reazioni nucleari. Saranno inoltre presentate le proprietà generali degli elementi transuranici e transattinidi (Z > 103).

L'applicazione dei radioisotopi alla datazione di reperti archeologici e geologici , l'uso di materiali radioattivi in medicina nucleare e il problema molto attuale dello smaltimento delle scorie radioattive, costituiranno la parte finale del corso.

Obiettivi formativi in Inglese: The course covers the basic principles of nuclear chemistry and some related fields of practical importance, and consists of the following sections: radioactive decay, ionizing radiation (properties, measurement), nuclear reactions, radioactive tracers, nuclear fission and fusion, principles of nuclear power generation. Chemical properties of transuranic and transactinide elements (Z > 103).

Part of the lectures will examine some practical applications of radioisotopes (archeological and geological dating and nuclear medicine. The problem of radioactive waste management will be discussed.

CFU: 3 Reteirabilità: 1

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica Nucleare	3	CHIM/03 CHIMICA GENERALE E INORGANICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

### Chimica Organica III (9 CFU)

Denominazione in Inglese: Organic Chemistry III

Obiettivi formativi: Il programma del corso si articola nei seguenti argomenti:
- Formazione di legami C-C e C-eteroatomo: alcheni coniugati di I, II e III specie; loro formazione e loro reattività in reazioni

di sostituzione e di condensazione con metodologie classiche ed avanzate

- Reazioni di cicloaddizione e cicloreversione: concetti generali, nomenclatura, loro studio mediante trattazione degli orbitali molecolari e regole di selezione di Woorward-Hoffmann
- Reazioni a trasferimento di idruro: concetti generali, trasferitori organici ed inorganici
- Processi di ossidazione non convenzionali: DMSO attivato, diossirani, periodinano di Dess-Martin
- Trasposizioni: elettrofiliche, radicaliche, nucleofiliche ; trasposizioni nucleofiliche 1,2, trasposizioni cicliche non 1,2, trasposizioni sigmatropiche, alliliche, elettrocicliche.

Il corso si prefigge l'obiettivo di far conoscere sia gli sviluppi più moderni di procedure sintetiche organiche classiche sia metodi innovativi di sintesi. Solo per gli studenti del curriculum Chimico-Organico le lezioni teoriche sono accompagnate da esercitazioni in aula per introdurre gli studenti alla proqettazione di sintesi di composti organici polifunzionali, anche di avanzata complessità, che possano avere anche un interesse applicativo in campo biochimico.

The course program is divided into the following topics:

- Formation of C-C and C-heteroatom bonds: alkenes conjugated I, II and III species, their formation and their reactivity in of substitution and condensation reactions by classical and advanced methods
- Cycloaddition and cycloreversion reactions: general concepts, nomenclature, their study through discussion of molecular orbitals and selection rules of Woorward-Hoffmann
- Hydride transfer reactions : general concepts, organic and inorganic transfer agents
- Unconventional oxidation systems: activated DMSO, dioxiranes, Dess-Martin periodinane
- Rearrangements: electrophilic, free-radical, nucleophilic, 1,2 nucleophilic rearrangements, non-1,2 rearrangements (sigmatropic and electrocyclic rearrangements), allylic rearrangements.

The course's objective is to make known both the latest developments of classical synthetic organic procedures and the innovative methods of synthesis. Only for students of Organic Chemical curriculum, theoretical lessons are accompanied by exercises in the classroom to introduce students to the design of synthesis of multifunctional organic compounds, including advanced complexity, which may have also an interest in applications such as biochemistry and agrochemistry.

### **CFU**: 9

### Reteirabilità: 1

#### Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Prova scritta e prova orale per gli studenti del curriculum organico, che frequentano entrambi i

Solo prova orale per gli studenti dei curricula diversi da quello organico, che frequentano il modulo "Chimica Organica III con esercitazioni in aula" (6 CFU).

Lingua ufficiale: Italiano

#### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Approccio Retrosintetico alla Sintesi Organica	3	CHIM/06 CHIMICA ORGANICA	Caratterizzanti	lezioni frontali + esercitazioni
Chimca Organica III con esercitazioni in aula	6	CHIM/06 CHIMICA ORGANICA	Caratterizzanti	lezioni frontali + esercitazioni

## Chimica Organica III con esercitazioni in aula (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Organic Chemistry III with classroom exercises

Obiettivi formativi: Il programma del corso si articola nei seguenti argomenti

- Formazione di legami C-C e C-eteroatomo: alcheni coniugati di I, II e III specie; loro formazione e loro reattività in reazioni di sostituzione e di condensazione con metodologie classiche ed avanzate
- Reazioni di cicloaddizione e cicloreversione: concetti generali, nomenclatura, loro studio mediante trattazione degli orbitali molecolari e regole di selezione di Woorward-Hoffmann
- Reazioni a trasferimento di idruro: concetti generali, trasferitori organici ed inorganici
- Processi di ossidazione non convenzionali: DMSO attivato, diossirani, periodinano di Dess-Martin
- Trasposizioni: elettrofiliche, radicaliche, nucleofiliche; trasposizioni nucleofiliche 1,2, trasposizioni cicliche non 1,2, trasposizioni sigmatropiche, alliliche, elettrocicliche.

Il corso si prefigge l'obiettivo di far conoscere sia gli sviluppi più moderni di procedure sintetiche organiche classiche sia metodi innovativi di sintesi. Solo per gli studenti del curriculum Chimico-Organico le lezioni teoriche sono accompagnate da esercitazioni in aula per introdurre gli studenti alla progettazione di sintesi di composti organici polifunzionali, anche di avanzata complessità, che possano avere anche un interesse applicativo in campo biochimico.

Obiettivi formativi in Inglese: The course program is divided into the following topics

- Formation of C-C and C-heteroatom bonds: alkenes conjugated I, II and III species, their formation and their reactivity in of substitution and condensation reactions by classical and advanced methods
- Cycloaddition and cycloreversion reactions: general concepts, nomenclature, their study through discussion of molecular orbitals and selection rules of Woorward-Hoffmann
- Hydride transfer reactions : general concepts, organic and inorganic transfer agents
- Unconventional oxidation systems: activated DMSO, dioxiranes, Dess-Martin periodinane
- Rearrangements: electrophilic, free-radical, nucleophilic, 1,2 nucleophilic rearrangements, non-1,2 rearrangements ( sigmatropic and electrocyclic rearrangements), allylic rearrangements.

The course's objective is to make known both the latest developments of classical synthetic organic procedures and the innovative methods of synthesis. Only for students of Organic Chemical curriculum, theoretical lessons are accompanied by exercises in the classroom to introduce students to the design of synthesis of multifunctional organic compounds, including advanced complexity, which may have also an interest in applications such as biochemistry and agrochemistry.

### **CFU**: 6

## Reteirabilità: 1

Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Prova scritta e prova orale per gli studenti del curriculum organico. Solo prova orale per gli studenti dei curricula diversi da quello organico.

Lingua ufficiale: Italiano



Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica Organica III con esercitazioni in aula	6	CHIM/06 CHIMICA ORGANICA	Caratterizzanti	lezioni frontali + esercitazioni

### Chimica Organica IV con esercitazioni in aula (9 CFU)

Denominazione in Inglese: Organic Chemistry IV with classroom exercises

Obiettivi formativi: Il corso si propone di far acquisire agli studenti la conoscenza di moderne metodologie, utilizzabili per preparazioni su piccola scala e talora anche su scala industriale, di composti organici di notevole interesse applicativo. tra queste prodotti della chimica fine quali farmaci, sostanze di interesse agrochimico e composti utilizzabili come precursori per la preparazione di nuovi materiali. Tra tali metodologie particolare enfasi sara' data alle reazioni di formazione di legami carbonio-carbonio o carbonio-eteroatomo catalizzate da composti di metalli di transizione, da quelle tradizionali coinvolgenti reagenti organometallici classici a quelle piu' innovative che prevedono l'attivazione di legami carbonio-idrogeno o eteroatomo-idrogeno, analizzandone sia gli aspetti sintetici che meccanicistici.

Obiettivi formativi in Inglese: The main goal of this course is to show the most recent protocols for the synthesis, from labscale to industrial-scale, of relevant classes of organic compounds including biologically-active derivatives, agrochemicals and new materials. Among these protocols, main enphasis will be given to the metal-mediated carbon-carbon and carbon-heteroatom bond formation reactions, starting from the classical procedures involving organometallic derivatives to the most innovative, such as carbon-hydrogen or carbon-heteroatom activation reactions. Practical and mechanistic aspects of the examined synthetic protocols will be critically discussed.

**CFU**: 9

Reteirabilità: 1

Propedeuticità: Chimica Organica III, Laboratorio di Chimica Organica III

Modalità di verifica finale: Esame scritto e orale

Lingua ufficiale: Italiano

#### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica Organica IV con esercitazioni in aula	9	CHIM/06 CHIMICA ORGANICA	Caratterizzanti	lezioni frontali + esercitazioni

### Chimica Quantistica e Modellistica Molecolare (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Quantum chemistry and molecular modelling

Obiettivi formativi: Il corso intende portare gli studenti ad un livello sufficientemente avanzato di conoscenze nel campo della chimica computazionale, al fine di saper scegliere ed applicare una varietà di tecniche e valutare la loro affidabilità per trattare problemi di interesse chimico. Argomenti trattati: basi quantistiche della chimica teorica (separazione dei moti, approssimazione di Born-Oppenheimer, teoremi variazionali, teoria delle perturbazioni); descrizione e studio delle superfici d energia potenziale (tecniche per la ricerca di minimi e punti di sella, stati vibrazionali nell'approssimazione armonica); interazioni intermolecolari (elettrostatica, induzione, dispersione, repulsione); metodi di Molecular Mechanics; antisimmetria delle funzioni d'onda e correlazione elettronica; metodi quantistici (Hartree-Fock, Interazione di Configurazioni, Multi-Configurational Self-Consistent Field, Møller-Plesset, Density Functional Theory, basi di funzioni atomiche, Effective Core Potentials, analisi delle popolazioni).

Obiettivi formativi in Inglese: The teaching aims at providing the students with a sufficiently advaced knowledge in the field of computational chemistry, to be able to select and apply a variety of techniques and to assess their reliability to investigate chemical problems. Topics that will be discussed: quantum foundations of theoretical chemistry (separation of motions, Born-Oppenheimer approximation, variational theorems, perturbation theory); description and exploration of potential energy surfaces (techniques for the search of minima and saddle points, vibrational states in the harmonic approximation); intermolecular interactions (electrostatics, induction, dispersion, repulsion); methods of Molecular Mechanics; antisymmetry of wavefunctions and electron correlation; quntum chemistry methods (Hartree-Fock, Configuration Interaction, Multi-Configurational Self-Consistent Field, Møller-Plesset, Density Functional Theory, atomic basis functions, Effective Core Potentials, population analysis).

**CFU**: 6

Reteirabilità: 1

Propedeuticità: La frequenza non è obbligatoria ma è consigliata.

Modalità di verifica finale: Esame

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica Quantistica e Modellistica Molecolare	6	CHIM/02 CHIMICA FISICA		lezioni frontali + esercitazioni

## Chimica teorica (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Theoretical Chemistry

Obiettivi formativi: Obiettivi formativi:

Comprendere e saper valutare criticamente i metodi di calcolo della chimica teorica.

Contenuti:

Seconda quantizzazione. Matrici densita'. Metodi della

chimica teorica: HF, DFT, MC-SCF, metodi perturbativi, Funzioni risposta statiche e dinamiche,

Forze intermolecolari.



**Objectivi formativi in Inglese:** A critical comprehension of the methods of calculation used in Theoretical Chemistry. Second quantization. Density matrices. Methods of the Theoretical Chemistry: HF, DFT, MC-SCF, perturbative. Static and dynamic response functions. Intermolecular forces.

CFU: 6 Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame scritto e orale

Lingua ufficiale: Italiano

#### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica teorica	6	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Affini o integrative	lezioni frontali

### Cristallografia Mod. I (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Crystallography

Obiettivi formativi: Il corso fornisce allo studente gli elementi basilari della cristallografia geometrica, nonché delle metodologie di indagine strutturale condotte con diffrazione di raggi X.

Richiami di cristallografia geometrica, gruppi spaziali. Richiami di cristallografia a raggi, tecniche sperimentali, il diffrattometro a cristallo singolo. Intensità dei raggi diffratti, fattore di struttura, densità elettronica. Determinazione della struttura, metodo di Patterson. Raffinamento della struttura e parametri geometrici.

Obiettivi formativi in Inglese: The goal of the course is to present the basic elements of geometrical crystallography, as well as the methods of structural investigation through X-ray diffraction.

**CFU:** 3

Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

#### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Cristallografia I	3	GEO/06 MINERALOGIA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

### Elettrochimica (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Electrochemistry

Obiettivi formativi: Introduzione. Definizioni e principi dell'elettrochimica e dei processi di trasferimento elettronico. Grandezze termodinamiche. Equilibrio elettrodico. Equazione di Nernst. Coefficienti di affinità. Classificazione delle celle: celle galvaniche e celle elettrolitiche. Potenziale elettrostatico. Potenziale di superficie.

Conducibilità delle soluzioni elettrolitiche: Conducibilità specifica ed equivalente. Misura di conducibilità e dipendenza dalla concentrazione. Teorie sulla conducibilità.

Diffusione: Leggi di Fick. Concetti e teorie fondamentali. Ponti salini. Celle con trasporto. Membrane iono-selettive. Elettrodo a vetro.

Cinetica elettrochimica: Equazioni cinetiche e velocità di reazione. Corrente di scambio. Vari tipi di sopratensione. Effetto dello stato di carica dell'elettrodo sulla cinetica. Determinazione sperimentale della sovratensione.

Tecniche per lo studio dei fenomeni elettrochimici: Potenziometria. Voltammetria. Polarografia. Alcuni esempi. Applicazioni. Cenni alle principali applicazioni industriali: raffinazione dei metalli, batterie non ricaricabili e ricaricabili. Celle a combustibile. Cenni alle applicazioni nel campo dei materiali: elettrodeposizione di metalli e trattamento delle superfici su scala nanometrica. Cenni ai meccanismi di degradazione e corrosione. Effetti elettrochimici sul funzionamento di display e sensori a cristalli liquidi.

OBIETTIVI:

Alla fine del corso i ragazzi dovranno aver acquisito familiarità con i principi e i metodi elettrochimici utilizzati sia a scopo analitico che chimico-fisico, in particolare finalizzati allo studio dei materiali di interesse tecnologico. Inoltre, sarà loro richiesto di approfondire uno degli argomenti proposti dal docente al fine di evidenziare le differenze tra la descrizione teorica e la realtà sperimentale.

Obiettivi formativi in Inglese: Thermodynamic introduction to electrochemistry. Cells without transference, concentration cells, membrane cells. Cells with transference. Transference numbers. Activity coefficient determinations. Diffusion potentials. An introduction to kinetic aspects of the electrode reactions and electrochemical corrosion.

CFU: 3

CFU: 3 Reteirabilità: 1

Propedeuticità: Nessuno
Modalità di verifica finale: esame

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Elettrochimica	3	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

### Enzimologia (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Enzymology



Obiettivi formativi: L'obiettivo del corso è quello di fornire una solida base di conoscenze della catalisi enzimatica. Allo studio delle caratteristiche generali degli enzimi e del loro meccanismo d'azione, si affianca l'analisi cinetica di reazioni enzimatiche a diverso grado di complessità, nonché lo studio di fattori influenti sulle proprietà catalitiche e quindi sul controllo dell'attività

Obiettivi formativi in Inglese: Aim of the course is to provide students with a solid background on enzyme catalysis. General features of enzymes and catalytic mechanisms will be considered. Kinetic analysis of enzymatic reactions with various grade of complexity will be performed. Factors affecting catalytic properties and modulating enzyme activities will be studied.

Reteirabilità: 1

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

#### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Enzimologia	6	BIO/10 BIOCHIMICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

### Fotochimica: aspetti teorici. (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Photochemistry: theoretical aspects

Obiettivi formativi: Obiettivi formativi:

acquisizione di conoscenze riguardanti gli aspetti teorici della dinamica di stati elettronici eccitati.

Contenuti:

Approssimazione di Born-Oppenheimer e transizioni non radiative; incroci evitati, intersezioni coniche. Transizioni radiative

fra stati elettronici: interazione materia-campo elettromagnetico classico. Principio di Franck-Condon.

Trasferimenti di energia tra singoletti: modelli di Forster e Dexter

Obiettivi formativi in Inglese: Training purpose:

knowledge of the theoretical aspects of the dynamics of excited electronic states.

Contents:

The Born-Oppenheimer approximation and non radiative transitions.

Avoided crossings, conical intersections. Electronic radiative transitions:

interaction matter - classical electromagnetic field. The Franck-Condon principle. Singlet state energy transfer: models of

Forster and Dexter. CFU: 3

Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Fotochimica: aspetti teorici	3	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

## Laboratorio di Chimica Analitica III (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Laboratory of Analytical Chemistry III

Obiettivi formativi: Il corso di Laboratorio di Chimica Analitica III consentirà allo studente di acquisire e approfondire le modalità di approccio all'analisi di matrici organiche complesse, in particolare affrontando lo studio di campioni provenienti dal campo ambientale, alimentare, biomedico e dei beni culturali. Alla fine del corso lo studente dovrà essere in grado di stabilire le potenzialità delle procedure analitiche utilizzate e di elaborare e valutare criticamente i dati e i risultati ottenuti.

Obiettivi formativi in Inglese: "The aim of Laboratorio di Chimica Analitica III is to give to the students a deep knowledge on the instrumental analytical techniques used in the analysis of complex organic matrices. It is also aimed to give a good level of confidence in the use of laboratory instruments used for the analysis of samples from food, environmental, biomedical and cultural heritage field. At the end of the course, the students should be able to establish the potentialities of the analitycal techniques used during the laboratory experiments and to critically evaluate the data and the results obtained.

CFU: 6

Reteirabilità: 1

Propedeuticità: La frequenza alle lezioni ed alle esercitazioni di laboratorio è obbligatoria. La frequenza alle lezioni è un requisito necessario per l'ammissione al laboratorio.

Modalità di verifica finale: Gli studenti verrano valutati sulla base delle relazioni relative alle esperienze di laboratorio. Lingua ufficiale: Italiano

## Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Laboratorio di Chimica Analitica III	6	CHIM/01 CHIMICA ANALITICA	Caratterizzanti	laboratorio e/o esercitazioni

### Laboratorio di Chimica Analitica V (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Laboratory of Analytical Chemistry V



Obiettivi formativi: L'obiettivo del corso è quello di mettere lo studente in grado di scegliere ed applicare la metodologia analitica più idonea per risolvere in modo affidabile le problematiche proposte in campo ambientale, chimico-clinico, chimico forense, in chimica degli alimenti e in chimica dei beni culturali. Tale obiettivo verrà raggiunto inserendo specifiche esperienze di laboratorio atte a mettere in pratica aspetti trattati nel corso teorico. il corso si sviluppa in moduli e permette di acquisire la pratica nelle aree chiavi della scienza analitica moderna.

Obiettivi formativi in Inglese: This course will give the student an overview of the overall analytical process and provide him with the skills needed to apply analytical methods, produce and understand analytical measurements in a wide range of disciplines: environmental science, food chemistry, forensic science, cultural heritage, medicine. The laboratory work will provide examples of analytical problem solving. It is offered in modular form for maximum flexibility, delivers a comprehensive training in the key areas of modern analytical science.

**CFU**: 6

#### Reteirabilità: 1

**Propedeuticità:** La frequenza alle lezioni ed alle esercitazioni di laboratorio è obbligatoria. La frequenza alle lezioni è un requisito necessario per l'ammissione al laboratorio.

Modalità di verifica finale: Gli studenti verrano valutati sulla base delle relazioni relative alle esperienze di laboratorio. Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Laboratorio di Chmica Analitica V	6	CHIM/01 CHIMICA ANALITICA	Caratterizzanti	laboratorio e/o esercitazioni

### Laboratorio di Chimica Inorganica II (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Laboratory of Inorganic Chemistry II

Obiettivi formativi: Il corso si propone di mostrare le tecniche per la sintesi, purificazione, manipolazione e caratterizzazione di composti inorganici e organometallici sensibili all'aria e di addestrare gli studenti in queste operazioni con pratica di laboratorio.

**Obiettivi formativi in Inglese:** The aim of this course is to present to the students practical methods of synthesis, handling, isolation, and purification of inorganic and organometallic compounds and their characterization by the current techniques by means of laboratory experiences.

**CFU**: 6

#### Reteirabilità: 1

Propedeuticità: La frequenza alle lezioni ed alle esercitazioni di laboratorio è obbligatoria. La frequenza alle lezioni è un requisito necessario per l'ammissione al laboratorio.

Modalità di verifica finale: Esame orale e valutazione della relazione scritta sulle esperienze di laboratorio Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Laboratorio di Chimica Inorganica II	6	CHIM/03 CHIMICA GENERALE E INORGANICA	Caratterizzanti	laboratorio e/o esercitazioni

### Laboratorio di Chimica Organica III (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Laboratory of Organic Chemistry III

Obiettivi formativi: L'obiettivo generale è quello di completare e sistematizzare le conoscenze teoriche e pratiche dello studente riguardo alla manipolazione, isolamento e purificazione di composti organici e la loro caratterizzazione strutturale, stereochimica e dinamica con tecniche NMR avanzate, mono e bidimensionali.

In particolare saranno affrontati i seguenti aspetti:

- •impiego di sostanze sensibili in atmosfera inerte;
- •effettuazione di reazioni catalitiche enantioselettive, corretta manipolazione, arricchimento stereochimico e valutazione della composizione enantiomerica di sostanze chirali tramite metodi cromatografici.
- •acquisizione di conoscenze teoriche e pratiche su NMR multinucleare, spettroscopia bidimensionale, metodi NMR di caratterizzazione strutturale, stereochimica e dinamica di molecole isolate e di loro aggregati, metodi NMR di rivelazione della diffusione traslazionale, metodi NMR di determinazione della purezza enantiomerica e configurazione assoluta. Dal punto di vista organizzativo, sono previste una serie di lezioni teoriche nel corso delle quali saranno illustrati i principi sperimentali generali delle tecniche di manipolazione e di analisi cromatografica e quelli della spettroscopia bidimensionale e dei metodi NMR di caratterizzazione stereochimica, dinamica e termodinamica. Seguirà lo svolgimento di esperienze di laboratorio di sintesi ed esercitazioni strumentali NMR. In particolare nel corso delle esperienze di sintesi saranno sfruttate tecniche di manipolazione in atmosfera inerte per lo svolgimento di una trasformazione catalitica enantioselettiva, che prevede la preparazione multistadio di un sistema catalitico chirale e il suo impiego per l'ottenimento di composti enantiomericamente arricchiti. Dei composti sintetizzati sarà realizzata la caratterizzazione strutturale e stereochimica tramite spettroscopia NMR, con l'impiego di differenti tecniche mono e bidimensionali. Per la determinazione della purezza enantiomerica dei composti chirali sintetizzati, saranno confrontate tecniche alternative di tipo cromatografico e NMR. A tale scopo saranno preparati anche opportuni derivati diastereoisomerici di alcuni dei composti chirali.

Obiettivi formativi in Inglese: The general aim of this course is to complete and the systematize the student's theoretical and practical skills on handling, isolation, and purification of organic compounds and their structural, stereochemical, and dynamic characterization by advanced, mono- and bidimensional, NMR techniques.

In particular, the following topics will be addressed in detail:

- inert-atmosphere techniques for the use of sensitive substances;
- execution of catalytic enantioselective reactions and correct handling, stereochemical enrichment, and evaluation of the enantiomer composition of chiral substances by chromatographic methods;
- theoretical and practical knowledge of multinuclear NMR, bidimensional spectroscopy, NMR methods for structural, stereochemical, and dynamic characterization of isolated molecules and their aggregates, NMR methods for the study of



translational diffusion, NMR methods for the determination of enantiomeric purity and absolute configuration.

Practically, the course will start with a cycle of lectures illustrating the general experimental principles of handling techniques, chromatographic analysis, bidimensional NMR methods, and stereochemical, dynamic and thermodynamic characterization by NMR methods. Then, the practical synthetic laboratory and instrumental NMR experiences will follow.

In detail, the synthetic practice will involve the use of inert atmosphere handling techniques for the execution of a catalytic enantioselective transformation, consisting in a multi-step preparation of a catalytic chiral system and its use for the synthesis of enantioenriched products. The compounds so obtained will be subjected to structural and stereochemical characterization by NMR techiques, both mono- and bidimensional. For the determination of the enantiomeric purity of the synthesized chiral compounds, alternative chromatographic and NMR methods will be compared. For this purpose, suitable diastereomeric derivatives will also be prepared.

CFU: 6

Reteirabilità: 1

**Propedeuticità:** La frequenza alle lezioni ed alle esercitazioni di laboratorio è obbligatoria. La frequenza alle lezioni è un requisito necessario per l'ammissione al laboratorio.

Modalità di verifica finale: Esame orale. Discussione degli argomenti trattati a lezione e delle esperienze di laboratorio e strumentali

Almeno 15 giorni prima della prova orale suddetta, è richiesta la consegna della relazione sulle esperienze di laboratorio e strumentali, redatta secondo le istruzioni ricevute.

Lingua ufficiale: Italiano

#### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Laboratorio di Chimica Organica III	6	CHIM/06 CHIMICA ORGANICA	Affini o integrative	laboratorio e/o esercitazioni

### Laboratorio di Tecniche Chimiche Avanzate (9 CFU)

Denominazione in Inglese: Advanced Chemistry Laboratory

Obiettivi formativi: Il corso intende presentare agli studenti una varietà di tecniche avanzate nei campi della sintesi chimica, dell'analisi e del controllo, dell'indagine di proprietà molecolari e di materiali e della chimica computazionale. L'apprendimento delle tecniche sarà in larga parte individuale, mediante la pratica di laboratorio presso gruppi di ricerca. Le lezioni avranno carattere seminariale su argomenti selezionati.

The course aims at introducing the students to a variety of advanced techniques in the fields of chemical synthesis, analysis and control, of the investigation of the properties of molecules and materials, and of computational chemistry. The learning will be mostly individual, through laboratory practice within research groups. The lectures will be in the form of seminars on selected topics.

Obiettivi formativi in Inglese: Advanced techniques will be used to study compounds or chemical reactions selected on the basis of the recent literature.

**CFU**: 9

Reteirabilità: 1

Modalità di verifica finale: Seminario tenuto dallo studente.

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Laboratorio di tecniche chimiche avanzate	9	CHIM/03 CHIMICA GENERALE E INORGANICA	Affini o integrative	laboratorio e/o esercitazioni

## Libera scelta (9 CFU)

Denominazione in Inglese: Free choice

**CFU**: 9

Reteirabilità: 1

Modalità di verifica finale: esame

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Libera scelta	9	NN No settore	Altre attività - scelta libera dello studente	altro

## Materiali Inorganici (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Inorganic Materials

Obiettivi formativi: Nel corso vengono prima introdotti alcuni metodi di indagine specifici per lo stato solido. Cristallografia e tecniche di diffrazione, fluorescenza X, microscopia ottica, microscopia elettronica a scansione e a trasmissione, microscopia a forza atomica. Viene poi presentata una rassegna dei metodi di produzione, delle relazioni tra struttura e proprietà e delle applicazioni di alcuni materiali inorganici sia di tipo tradizionale che di tipo avanzato che hanno raggiunto la soglia della produzione industriale. I materiali trattati riguardano boro, alluminio, carbonio e silicio; conduttori, semiconduttori e giunzioni p-n; quarzo, silice, colloidi e sol, vetri; mullite; argille, cementi e materiali ceramici; ghisa e acciai. Ogni anno un esperto



proveniente dal mondo industriale sostituirà il docente ufficiale nel presentare un argomento monografico tra quelli elencati sopra.

Objettivi formativi in Inglese: The course starts introducing some methods of analysis specific to the solid state. Crystallography and diffraction techniques, X-ray fluorescence, optical microscopy, scanning and transmission electron microscopy, atomic force microscopy. Then follows, a review of production methods, of the relationship between structure and properties and of applications of some inorganic materials both traditional and advanced type that have reached the threshold of industrial production. The materials covered include boron, aluminium, carbon and silicon, conductors, semiconductors and p-n junctions, quartz, silica, colloids and sol, glass, mullite, clays, cement and ceramic materials, pig iron and steel. Every year, an expert from the industrial world will replace the official teacher in presenting a monographic topic among those listed above.

CFU: 6 Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

#### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Materiali Inorganici	6	CHIM/03 CHIMICA GENERALE E INORGANICA	Caratterizzanti	lezioni frontali + esercitazioni

### Metalli in Medicina (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Metals in Medicine

Obiettivi formativi: Fornire le conoscenze di base sulle caratteristiche e sulle modalità di azione di molecole contenenti ioni metallici utilizzati in medicina come agenti terapeutici e diagnostici, con particolare riferimento ai metalli di transizione.

Tecniche d'indagine per la caratterizzazione delle interazioni tra complessi metallici e biomolecole, utile per la comprensione del meccanismo di azione di tali composti: spettrofotometria UV-Visibile e dicroismo circolare, spettrometria di massa, cristallografia a raggi X

CFU: 3 Reteirabilità: 1

**Propedeuticità:** Per una migliore comprensione del corso è consigliata la conoscenza della Chimica Inorganica e quella dei Composti di Coordinazione. Nozioni base di Bioinorganica possono essere utili.

Modalità di verifica finale: esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Metalli in Medicina	3	CHIM/03 CHIMICA GENERALE E INORGANICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

## Metallorganica (9 CFU)

Denominazione in Inglese: Organometallic Chemistry

Obiettivi formativi: Obiettivo del corso è affrontare uno studio sistematico della chimica dei composti dei metalli di transizione che contengano almeno un legame metallo-carbonio e illustrare le loro più importanti applicazioni. Dopo una prima parte in cui vengono discussi aspetti generali, andamenti periodici, effetti cinetici e termodinamici e reazioni di interesse comune nella chimica organometallica, sarà esaminata in dettaglio la chimica dei gruppi funzionali (alchili, arili, vinili, alchinili, carbonili, carboni, carbini, vinilideni, complessi di olefine, dieni, alchini, allili, areni ed enili ciclici, idruri e altri leganti con donatori diversi dal carbonio).

Obiettivi formativi in Inglese: The goal of this course is to examine in detail the systematic chemistry of transition metal derivatives with at least one metal-carbon bond and to illustrate their main applications. After an introduction on general aspects, periodic trends, kinetic and thermodynamic effects and classical organometallic reactions, the chemistry of functional groups (alkyls, aryls, vinyls, alkynyls, carbonyls, carbenes, carbynes, vinylidenes, olefin, diene and alkyne complexes, allyls, arenes and cyclic enyls, hydrides and other important non-carbon ligands) will be illustrated in detail. CFU: 9

Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Chimica Metallorganica di base	6	CHIM/03 CHIMICA GENERALE E INORGANICA	Affini o integrative	lezioni frontali
Chimica dei Composti Contenenti Legami Metallo- Metallo	3	CHIM/03 CHIMICA GENERALE E INORGANICA	Affini o integrative	lezioni frontali

## Metodi di simulazione (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Simulation techniques

Obiettivi formativi: Obiettivi formativi:

fondamenti dei principali meodi di simulazione, anche per un utilizzo consapevole di programmi commerciali Contenuti:

Metodo Monte Carlo in vari insiemi statistici. Dinamica molecolare classica e ab initio. Esercitazioni 'di laboratorio' per scrittura di codici e impiego di programmi commerciali.

Obiettivi formativi in Inglese: Monte Carlo method in various statistical ensembles. Classic and ab initio molecular dynamics. Tutorials for preparing original codes and using commercial packages.

**CFU**: 3

Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame

Lingua ufficiale: Italiano

#### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Metodi di simulazione	3	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali + esercitazioni

### Metodi innovativi in sintesi organica (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Innovative methods in organic synthesis

Obiettivi formativi: Il corso si propone di dare agli studenti conoscenze riguardo alcuni nuovi metodi di catalisi asimmetrica. La prima parte del corso tratta dell'attivazione asimmetrica di catalizzatori non chirali, dei fenomeni di amplificazione della chiralità quali effetti non lineari ed autocatalisi. Nella seconda parte vengono trattati i principi dell'organocatalisi asimmetrica a le sue applicazioni con particolare riguardo alla reazioni di formazione di legami carbonio-carbonio.

Obiettivi formativi in Inglese: Aim of the course is to give information about some new methods of asymmetric catalysis. Topics of the first part of the course will be the asymmetric activation of non-chiral catalysts and the study of chirality amplification phenomena, such as non-linear effects and autocatalysis. The second part will deal with asymmetric organocatalysis principles and applications, with special care to carbon-carbon forming reactions.

**CFÜ**: 3

Reteirabilità: 1

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Metodi innovativi in sintesi organica	3	CHIM/06 CHIMICA ORGANICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

## Metodi matematici della Chimica Fisica (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Mathematical methods of physical chemistry

Obiettivi formativi: Il corso intende fornire agli studenti del curriculum Chimico-Fisico alcuni strumenti matematici, di calcolo numerico e di programmazione utili per la comprensione di modelli teorici ed per applicazioni computazionali in chimica, meccanica quantistica molecolare, spettroscopia e termodinamica. Il laboratorio di programmazione introdurrà gli studenti all'uso del sistema linux e del linguaggio Fortran.

Obiettivi formativi in Inglese: The course aims at providing the students of the Curriculum in Physical Chemistry with the mathematical tools to understand theoretical models and computational applications in chemistry, molecular quantum mechanics, spectroscopy and thermodynamics. Contents: Vector spaces (scalar product and Dirac notation; linear operators, inverse operator, adjoint operator, hermitian and unitary operators, projection operators; linear independence, basis sets in finite spaces, matrix representation; determinants, sets of linear equations, inverse matrix, basis set transformations; eigenvectors and eigenvalues, commuting hermitian operators). Postulates and theorems of Quanum Mechanics (identification of quantum states, uncertainty principle, Ehrenfest, virial and Hellmann-Feynman theorems). Theory of analytic functions (Cauchy-Riemann conditions, Cauchy theorem, integral representation of analytic functions and their derivatives; Cauchy-Liouville and Morera theorems, Taylor and Laurent series, zeroes and singular points, calculus of residues). Vector spaces of infinite dimension (space of continuous functions, complete spaces, Hilbert spaces, L2 spaces, convergence in the mean, orthonormal sets, Bessel inequality, expansion of L2 functions in polynomials, classical orthogonal polynomials, Fourier series, Fourier transform, generalized functions, Dirac's delta function). Examples of applications: convolution, diffusion equations, evolution of wavepackets.

CFU: 6 Reteirabilità: 1

Propedeuticità: Nessun obbligo di frequenza

Modalità di verifica finale: Esame

Lingua ufficiale: Italiano

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Laboratorio di calcolo	3	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Affini o integrative	lezioni frontali+laboratorio
Metodi matematici	3	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Affini o integrative	lezioni frontali + esercitazioni

## Metodi Spettroscopici Avanzati (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Advanced Spectroscopic Methods

Obiettivi formativi: Il corso si occupa di argomenti di spettroscopia molecolare non affrontati nel corso triennale in Chimica, ma che hanno rilevanza teorica e/o applicativa. Riguarda quindi argomenti avanzati di spettroscopie già trattate (fluorescenza, NMR) e basi di spettroscopie non trattate (ESR, Raman, fotoelettronica, dielettrica, Mossbauer). In particolare vengono affrontati i seguenti aspetti:

Argomenti avanzati di spettroscopia NMR: dai principi all'approccio quantomeccanico, interazioni nucleari, cenni di NMR allo stato solido, metodi NMR per lo studio della dinamica molecolare.

Principi ed applicazioni base della spettroscopia ESR.

Argomenti avanzati di spettroscopia di fluorescenza: metodi stazionari e risolti nel tempo; anisotropia di fluorescenza.

Principi della spettroscopia Raman vibrazionale e rotazionale.

Principi della spettroscopia fotoelettronica.

Principi ed applicazioni della spettroscopia dielettrica.

Principi della spettroscopia Mossbauer.

Obiettivi formativi in Inglese: This course deals with subjects of molecular spectroscopy that were not treated in the first 3 years of the degree in Chemistry, but which have a big importance from either the theoretical or the applicative standpoint. In particular, the course deals with advanced subjects of already met spectroscopies (fluorescence, NMR) and basics of spectroscopies never met by the students (ESR, Raman, photoelectronic, dielectric, Mossbauer). In particular, the following aspects will be treated:

Advanced subjects of NMR spectroscopy: from basics to the quanto-mechanical approach, nuclear interactions, hints of solid-state NMR, NMR methods for the study of molecular dynamics.

Basics and applications of ESR spectroscopy.

Advanced subjects of fluorescence spectroscopy: stationary and time-resolved methods; fluorescence anisotropy.

Basics of vibrational and rotational Raman spectroscopy.

Basics of photoelectronic spectroscopies

Basics and applications of dielectric spectroscopy.

Basics of Mossbauer spectroscopy.

CFU: 6 Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

#### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Metodi Spettroscopici Avanzati	6	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Caratterizzanti	lezioni frontali + esercitazioni

### Modellistica molecolare per i sistemi complessi (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Molecular Modeling for complex systems

Obiettivi formativi: Il corso si propone di fornire i fondamenti dei piu' usati metodi ibridi e/o combinati quantomeccanici/classici per studiare le

proprieta' chimiche e fisiche di bio e nanosistemi e di sistemi molecolari in ambienti complessi.

Applicazioni degli stessi metodi e valutazione critica dei risultati ottenibili saranno inoltre presentate.

Obiettivi formativi in Inglese: Descrizione e obiettivi formativi:

The course will give a description of the most common hybrid and/or combined quantum mechanical/classical methods to study chemical and physical properties of bio- and nano-systems and molecular systems in complex environments. Applications of the same methods and their critical evaluation will also be given.

Reteirabilità: 1

Propedeuticità: Propedeuticita': Chimica quantistica e modellistica molecolare.

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Modellistica molecolare per i sistemi complessi	3	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

### Sensori e Biosensori (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Sensors and Biosensors

Obiettivi formativi: I sensori chimici sono dispositivi analitici in grado di convertire uno stimolo di natura chimica in un segnale, generalmente elettrico. Essi consentono di ottenere informazioni velocemente e a basso costo, anche a distanza o in ambienti ostili, generalmente a prezzo (rispetto alla strumentazione analitica tradizionale) di una perdita di qualità dell'informazione ottenuta (in termini di accuratezza, precisione, completezza).

Il corso fornisce allo studente le nozioni basilari per comprendere i principi di funzionamento delle principali tipologie di sensori e dà uno spaccato dello sviluppo della ricerca in questo settore: 3 CFU sono dedicati alla teoria e 3 CFU sono dedicati al laboratorio. Per la natura dell'argomento trattato, esso ha carattere multidisciplinare. Nel corso vengono descritti: caratteristiche generali dei sensori (definizioni, componenti, modalità di classificazione, caratteristiche statiche e dinamiche), elementi di teoria dei segnali (cos'è un segnale, spettro, conversione analogico-digitale, modalità di acquisizione, disturbi e rumore), elementi di misure elettroniche (tensione, corrente, resistenza, frequenza, strumentazione relativa), elementi di



fisica dello stato solido ed elettronica (conduzione nei metalli e nei semiconduttori, giunzione p-n, transistor), caratterizzazione e funzionalizzazione chimica delle superfici, biosensori, bilance microgravimetriche, sensori ottici, sensori ad ossido metallico, CHEM-FET, sistemi multisensore.

L'obiettivo del corso è quello di mettere lo studente in grado di leggere autonomamente la letteratura in materia e di poter scegliere criticamente il sensore più adatto ad un uso specifico

Obiettivi formativi in Inglese: Chemical sensors are analytical devices capable of converting a chemical stimulus into a signal, generally of an electrical nature. They allow to obtain information quickly and at low cost, even in the distance or in harsh environments, paying the price, in comparison to traditional analytical equipment, of a loss in the quality of the information (in terms of accuracy and completeness). The course provides the student with the basic knowledge needed to understand the working principles of the main sensor types and gives him an overview of current research activities in this field.

CFU: 3 Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

#### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Sensori e Biosensori	3	CHIM/01 CHIMICA ANALITICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

### Sintesi e Tecniche Speciali Organiche (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Special Organic Syntheses and Techniques

Obiettivi formativi: Scopo di questo corso è di introdurre lo studente alla moderna sintesi organica, ed in particolare alla sintesi organica sostenibile.

Pertanto, dopo un'introduzione sulle strategie sintetiche, saranno presentati i concetti, i significati e gli scopi della cosiddetta 'green chemistry'. Seguirà una descrizione generale delle metodologie sintetiche più 'verdi' (con particolare attenzione all'uso di solventi alternativi quali l'acqua, i liquidi ionici e la CO2 supercritica, casi come all'organocatalisi). Saranno infine trattati molto più in dettaglio tre tipi di reazioni organiche attualmente considerati particolarmente efficienti, 'green' e sostenibili: le reazioni fotochimiche organiche, le reazioni sonochimiche e le reazioni promosse da microonde.

**Obiettivi formativi in Inglese:** The main aim of this Course is to introduce students to modern organic synthesis, and in particular to sustainable organic synthesis.

Therefore, after a discussion on the synthetic strategies, the concepts and the scope of the so-called 'green chemistry' will be introduced. It will follow a brief description of the greener synthetic methodology (with detail attention to the use of alternative solvents as water, ionic liquids and supercritical CO2, as well as to the organocatalysis). At last, three kinds of organic reactions, currently considered particularly green, sustainable and efficient, will be examined: the photochemical organic reactions, the sonochemical organic reactions and the microwave-promoted reactions.

CFU: 3 Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Sintesi e Tecniche Speciali Organiche	3	CHIM/06 CHIMICA ORGANICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

### Sintesi organiche stereoselettive (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Stereoselective organic syntheses

Obiettivi formativi: Il corso si prefigge l'obiettivo di far conoscere i metodi sintetici più moderni, sia catalitici che stechiometrici, per la sintesi di molecole organiche chirali ad elevato eccesso enantiomerico, molte delle quali aventi importante attività biologica.

Il programma del corso si articola nei seguenti argomenti

- Riepilogo dei concetti base di stereochimica
- Reazioni di ossidazione enantioselettiva: epossidazione asimmetrica di Sharpless, epossidazione asimmetrica di Jacobsen, epossidazione asimmetrica con catalizzatori metal-free (Julià-Colonna, Shi), diidrossilazione e amminoidrossilazione asimmetrica di Sharpless,
- Formazione enantioselettiva di legami C-C: reazione di ciclopropanazione asimmetrica di olefine, reazione aldolica enantioselettiva, reazione enantioselettiva carbonile-ene
- Idrogenazione asimmetrica di alcheni funzionalizzati, di sunbstrati imminici e carbonilici
- Effetti non-lineari ed autocatalisi.

Il corso si prefigge l'obiettivo di far conoscere i metodi sintetici più moderni, sia catalitici che stechiometrici, per la sintesi di molecole organiche chirali ad elevato eccesso enantiomerico, molte delle quali aventi importante attività biologica.

**Obiettivi formativi in Inglese:** The course aims to raise awareness of modern synthetic methods, both catalytic and stoichiometric, for the synthesis of chiral organic molecules with high enantiomeric excess, many of them with important biological activity.

The course program is divided into the following topics

- Summary of the basic concepts of stereochemistry
- Enantioselective oxidation reactions: allyl alcohols asymmetric epoxidation (Sharpless), asymmetric olefin epoxidation (Jacobsen), asymmetric epoxidation with metal-free catalysts (Julià-Colonna, Shi), asymmetric olefin dihydroxylation and aminohydroxylation (Sharpless)
- Enantioselective formation of C-C bonds: asymmetric cyclopropanation of olefins, enantioselective aldol reaction,



enantioselective carbonyl-ene reaction

- Asymmetric hydrogenation of functionalized alkenes and imino and carbonyl substrates

- Non-linear effects and autocatalysis.

CFU: 3 Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

#### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Sintesi organiche stereoselettive	3	CHIM/06 CHIMICA ORGANICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

### Sostanze Organiche di Interesse Agrochimico (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Organic Agrochemicals

Obiettivi formativi: L'intento principale del Corso, è quello di delucidare l'importanza e le implicazioni della Chimica Organica nell'agricoltura nonché di introdurre gli studenti nel mondo dei composti organici usati in agricoltura e delle problematiche (ad esempio, sintetiche, industriali, ambientali, tossicologiche, economiche, etiche) connesse con lo studio, la progettazione, la preparazione e l'uso di tali composti. E' da rilevare che molte di queste problematiche sono presenti anche in altri settori connessi con la Chimica Organica Applicata/Industriale (e.g., quelli farmaceutici, biologici, cosmetici).

A questo scopo, saranno presentate l'origine, l'evoluzione e le prospettive dei principali tipi di pesticidi (fungicidi, insetticidi ed erbicidi, oggi essenzialmente composti organici). Saranno esaminate le strutture, le proprietà e le caratteristiche delle più importanti classi di questi pesticidi e saranno discusse le principali questioni che riguardano la loro preparazione ed il loro uso, nonché i loro possibili sviluppi futuri. Uno specifico capitolo sarà infine dedicato ai feromoni degli insetti (utilizzabili come 'green agrochemicals'), al loro ruolo e funzionamento in natura e alle loro possibilità di impiego nella lotta contro gli insetti stessi.

Obiettivi formativi in Inglese: The main aim of the Course is to explain the importance and the implications of Organic Chemistry in the agriculture, as well as to introduce students to the world of Organic Agrochemicals and of problems (for example, synthetic, industrial, environmental, toxicological, economic, ethical) connected with their study, planning, preparation and use. It is worth of nothing that many of these problems are present also in other areas of Applied/Industrial Organic Chemistry (e.g., pharmaceutical, biological, cosmetic).

Organic Chemistry (e.g., pharmaceutical, biological, cosmetic).

For this purpose, the origin, the evolution and the perspective of the major types of pesticides (insecticides, fungicides and herbicides – almost all pesticides used today are organic compounds) will be presented and the main questions concerning their preparation and use will be discussed, as well as their possible future developments. A separate chapter will be devoted to insect pheromones (a class of compounds used as 'green' agrochemicals), to their natural role and to their use in pest control.

CFU: 3 Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Sostanze Organiche di Interesse Agrochimico	3	CHIM/06 CHIMICA ORGANICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

## Sostanze Organiche Naturali di Interesse Biologico e Applicativo (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Organic Natural Substances of Biological and Applicative Interest

Obiettivi formativi: Il corso si propone di fornire una moderna introduzione su importati classi di prodotti naturali biologicamente attivi e utili da un punto di vista medico o agronomico. Suo obiettivo sarà anche quello di fornire allo studente strumenti di interpretazione e comprensione, da un punto di vista chimico, di alcuni importanti aspetti del metabolismo secondario, essenziali per la vita. Più in particolare, durante il Corso, dopo un'introduzione sui mattoni biosintetici ed i meccanismi delle reazioni coinvolte nei processi biosintetici, verranno esaminate in dettaglio alcune delle principali vie biogenetiche, quali la via dell'acetato, la via del mevalonato e la via dello scikimato. Le notizie su tali vie verranno integrate da informazioni sui metaboliti di maggior interesse biologico e applicativo, sulla loro bioattività, sulle loro fonti naturali e sui loro possibili impieghi. Particolare riferimento verrà fatto a sostanze naturali ed a loro analoghi strutturali sia di impiego terapeutico o diagnostico che di rilevante interesse agrochimico.

Objettivi formativi in Inglese: This course aims to provide a modern introduction to important classes of biologically active and medicinally or agronomically useful natural compounds. Its objective is also to give students instruments for the understanding and the interpretation, from a chemical point of view, of some important aspects of the secondary metabolism, essential for the life. In particular, after an introduction to biosynthetic building blocks and construction mechanisms, some important biogenetic pathways will be examined in detail: the acetate pathway, the scikimate pathway and the mevalonate pathway. Moreover, information will be supplied on the bioactivity, the natural sources and the possible uses of the metabolites of greater biological and applicative interest. Emphasis will be given to natural substances, or their analogues, medicinally or agronomically important.

CFU: 6 Reteirabilità: 1

Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano



Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Sostanze Organiche Naturali di Interesse Biologico e Applicativo	6	CHIM/06 CHIMICA ORGANICA	Affini o integrative	lezioni frontali

### Spettroscopia NMR allo stato solido (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Solid State NMR spectroscopy

Obiettivi formativi: Il corso si occupa di fornire le basi teoriche ed un panorama delle applicazioni dell'NMR a stato solido per varie classi di materiali.

Gli argomenti trattati sono di seguito elencati.

Basi dell'NMR. Confronto tra l'approccio classico e quello quanto-meccanico.

Interazioni degli spin nucleari. Gli Hamiltoniani di spin "interni", interazione di schermo chimico, interazione dipolare, interazione scalare, interazione quadrupolare, l'effetto dei moti molecolari, differenze tra solidi e liquidi.

Tecniche essenziali per l'NMR allo stato solido in bassa ed alta risoluzione. Solid Echo, Magic Angle Spinning (MAS), tecniche di disaccoppiamento eteronucleare, tecniche di disaccoppiamento omonucleare, Cross-Polarization (CP). Tempi di rilassamento T1, T2 e T1ρ. Spin diffusion.

Relazione tra proprietà NMR, proprietà fisiche e materiali. Come investigare struttura e dinamica molecolare su ampi range spaziali e temporali. Applicazioni a diverse classi di materiali attraverso le seguenti tecniche: spettri MAS per la misura di chemical shift isotropi (vari nuclei); tecniche selettive MAS; sequenze di impulsi per la misura di: anisotropia di chemical shift in cristalli liquidi e solidi, interazioni scalari, interazioni dipolari etero- e omo-nucleari (tecniche di correlazione, misura di distanze internucleari), interazioni quadrupolari (tecniche ad alta e bassa risoluzione), tempi di rilassamento, processo di spin diffusion.

Obiettivi formativi in Inglese: This course deals with the basic principles of solid-state NMR and its applications to a variety of materials

The treated subjects are listed in the following.

Basics of NMR. Comparison between the classical and quanto-mechanical approaches. Nuclear spin interactions. Internal spin Hamiltonians, chemical shielding, dipolar, scalar, quadrupolar interactions, the effect of molecular motions, differences between solids and liquids.

Essential low- and high-resolution solid-state NMR techniques: solid echo, magic angle spinning (MAS), hetero- and homo-nuclear decoupling schemes, cross-polarization (CP). T1, T2 e T1p relaxation times. Spin diffusion.

Relationship among NMR properties, physical properties and materials. How to investigate structural and molecular dynamics over broad spatial and time ranges. Applications to different classes of materials through the following techniques: MAS spectra for the measurement of isotropic chemical shifts of various nuclei; selective MAS techniques; pulse sequences for the measurement of: chemical shift anisotropy in solids and liquid crystals, scalar interactions, homo- and hetero-nuclear interactions (correlation techniques, measurement of internuclear distances), quadrupolar interactions (low- and high-resolution techniques), relaxation times, spin diffusion.

CFU: 3 Reteirabilità: 1

Propedeuticità: No Modalità di verifica finale: esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Spettroscopia NMR allo stato solido	3	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

### Spettroscopia NMR in biomedicina e nel settore agroalimentare (3 CFU)

Denominazione in Inglese: NMR spectroscopy in biomedicine and food chemistry

Obiettivi formativi: Fornire allo studente le basi per la comprensione delle principali applicazioni della tecnica NMR nel settore biomedico e agroalimentare.

Objectivi formativi in Inglese: Make the student able to understand main applications of NMR spectroscopy in biomedicine and food chemistry.

CFU: 3 Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

## Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Spettroscopia NMR in biomedicina e nel settore agroalimentare	3	CHIM/06 CHIMICA ORGANICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

## Stereochimica (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Stereochemistry

Obiettivi formativi: Individuazione critica dei parametri che caratterizzano stereochimica in soluzione (struttura, conformazione e configurazione relativa/assoluta) di molecole organiche e di loro complessi con metalli e con biomolecole. Acquisizione dei principi delle principali tecniche sperimentali per l'indagine stereochimica. Sterochimica classica dei composti organici aciclici e ciclici. Considerazioni termodinamiche e cinetiche Entalpie



conformazionali

Dicroismo circolare elettronico (ECD): Definizioni e principi di funzionamento. Principali approcci interpretatitivi: metodi empirici, semiempirici, non empirici. Metodo degli oscillatori accoppiati: descrizione e caratterizzazione delle transizioni elettroniche nei principali cromofori organici. Determinazione dei momenti di dipolo di transizione in sistemi non precedentemente descritti. Valutazione quali/quantitativa degli spettri ECD. Stereochimica dell'interazioni tra molecole organiche e proteine. Cenni sul CD vibrazionale (VCD).

Metodi cromatografici per l'analisi di miscele stereoisomeriche.

Cromatografia diastereoselettiva ed enantioselettiva. Isomerizzazione in colonna e analisi dei profili dinamici. Uso di tecniche accoppiate (per esempio HPLC-CD).

Metodi di risoluzione di miscele di enantiomeri: cristallizzazione e risoluzioni cinetiche.

Richiamo dei principali metodi NMR per lo studio conformazionale (NOE e costanti di accoppiamento). Metodi basati sull'anisotropia magnetica: correnti d'anello. NMR paramagnetica: spostamenti di contatto, pseudocontatto e velocità di rilassamento. Uso di sonde paramagnetiche per la caratterizzazione dei residui esposti in sistemi macromolecolari. Altri usi strutturali delle sonde paramagnetiche e dei reagenti di shift. Uso combinato di dati sperimentali per l'ottimizzazione strutturale in alcuni pacchetti software commerciali.

Objectivi formativi in Inglese: Recognize the parameters characterizing solution stereochemistry of organic compounds and of their complexes with metals and biomolecules. Discuss principles and applications of the main experimental techniques for conformational and configurational analysis.

Classical organic stereochemistry: cyclic and acylclic compounds. Entalpy and Entropy and their effects in dynamic processes and equilibrium distributions. Conformational enthalpies.

Electronic Circular Dichroism: principles and applications. Organic chromophores, comparison between spectra; exciton coupling. Elements of computational methods. Configuration and conformation assignments.

Vibrational Circular Dichroism (VCD). Principles and selected application examples.

Chromatographic techniques for separating and quantifying stereoisomers

Diastereoselective and enantioselective methods. Hyphenated techniques (HPLC-CD)-

Enantiomer resolutions through crystallization and kinetic resolution.

**CFU**: 6

Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

#### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Stereochimica	6	CHIM/06 CHIMICA ORGANICA	Caratterizzanti	lezioni frontali

### Stereochimica dei Biopolimeri (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Stereochemistry of Biopolymers

Obiettivi formativi: Acquisire le conoscenze sui più importanti metodi di indagine strutturale di biopolimeri (polipeptidi, acidi nucleici, polisaccaridi), in soluzione ed allo stato solido, e dei loro complessi con molecole organiche.

Metodi spettroscopici e computazionali per l'indagine stereochimica di biopolimeri

- 1) Cristallografia a raggi-X
- 2) NMR
- a. Correlazioni 2D omo/eteronucleari
- b. Indice di chemical shift, effetti NOE, accoppiamenti J
- c. Accoppiamenti dipolari residui
- d. NOE trasferito e trasferimento di saturazione
- 3) Dicroismo circolare
- a. Metodi empirici (per l'analisi della struttura secondaria)
- b. Accoppiamento eccitonico e metodi non empirici
- c. CD indotto
- d. CD vibrazionale (VCD)
- e. Dicroismo lineare (LD)
- 4) Meccanica molecolare (MM) vincolata, Dinamica molecolare (MD)

Applicazioni

- 1) Peptidi e proteine
- a. Fattori determinanti e analisi della struttura secondaria e terziaria
- b. Rilevazione dei processi di folding-unfolding
- c. Rilevazione e quantificazione delle interazioni con leganti organici

(es. farmaci e cofattori)

- 2) Acidi nucleici
- a. Fattori determinanti e analisi della struttura secondaria
- b. Rilevazione e quantificazione delle interazioni con intercalanti o altro

Obiettivi formativi in Inglese: Learn and discuss some of the most relevant methods for the structural analysis of the main biopolymers (polypeptides, polynyuclotides polysacchardies), both in solution and in the solid state, and of their complexes with organic and inorganic systems.

Spectroscopic tools for the stereochemistry of biopolymers.

- 1) X-ray crystallography
- 2) NMR
- a. 2D homo/heteronuclear correlations
- b. chemical shift index, NOE, J-couplings
- c. residual dipola couplings
- d. Transferred NOE and Saturation Transfer
- 3) Electronic and Vibrational Circular Dichroism (ECD, VCD)
- a. Secondary structure analysis through empirical methods
- b. Exciton coupling and non-empirical methods
- c. Induced CD
- d. Linear Dichroism (LD)
- 4) Constrained Molecular Mechanics (MM)



Applications

3) Peptides and proteins

a. Analysis of secondary and tertiary structure elements

b. Folding and unfolding processes

c. Interactions involving organic molecules (drugs, cofactors) and inorganic species (metal ions and complexes)

4) Nucleic acids

a. Analysis of secondary structure elements

b. Interactions involving organic molecules (drugs, cofactors) and inorganic species (metal ions and complexes). Groove binding and intercalation

CFU: 3 Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

#### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Stereochimica dei biopolimeri	3	CHIM/06 CHIMICA ORGANICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

### Strutturistica Chimica (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Molecular structure and symmetry

Obiettivi formativi: Obiettivi formativi:

saper applicare la teoria dei gruppi alla simmetria molecolare.

Contenuti:

Simmetria molecolare. Teoria dei gruppi: definizioni e concetti matematici. Teoria dei gruppi e struttura molecolare. Operatori e gruppi d'invarianza. Gruppi puntuali. Teoria delle rappresentazioni.

Applicazioni: costruzione di funzioni adattate alla simmetria (SALC), transizioni elettroniche e regole di selezione, simmetria e stati vibrazionali, regole di selezione nella spettroscopia IR e Raman.

**Obiettivi formativi in Inglese:** The course involves the study of molecular symmetry and group theory with applications to chemistry. The theory of representations of point groups is developed and used to study molecular structure and to explain the electronic and vibrational spectra of simple molecules.

Projection operators are explicitly presented and used in applications for the construction of symmetry adapted linear combinations (SALC) of atomic orbitals.

**CFU**: 3

Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame

Lingua ufficiale: Italiano

## Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Strutturistica Chimica	3	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

### Tecniche Strumentali Avanzate in Chimica Organica e Biorganica (3 CFU)

Denominazione in Inglese: Advanced Instrumental Techniques in Organic and Biorganic Chemistry

Obiettivi formativi: Fornire le conoscenze necessarie per effettuare in modo autonomo la completa caratterizzazione spettroscopica tramite tecniche NMR mono e bidimensionali di molecole di struttura complessa, di determinare i parametri

stereochimici, dinamici e termodinamici di complessi o addotti supramolecolari che coinvolgono anche sistemi biomacromolecolari, di determinare la purezza enantiomerica e la configurazione assoluta di molecole chirali.

Obiettivi formativi in Inglese: Make the student able to perform the complete spectroscopic characterization by mono and bidimensional techniques of molecules with complex structures, to determine stereochemical, dynamics and thermodynamics parameters of supramolecular complexes or adducts also involving biomacromolecules, to determine the enantiomeric purity and absolute configuration of chiral compounds.

CFU: 3 Reteirabilità: 1

Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Tecniche Strumentali Avanzate in Chimica Organica e Biorganica	3	CHIM/06 CHIMICA ORGANICA	Altre attività - scelta libera dello studente	lezioni frontali

## Termodinamica delle soluzioni, delle soluzioni organizzate e dei sistemi colloidali (6 CFU)

 $\textbf{\textit{Denominazione in Inglese:}} \ \textbf{Thermodynamics of solutions, organized solutions and colloids}$ 

Obiettivi formativi: Lo studente dovrà conseguire le necessarie competenze metodologiche per un corretto trattamento, da un punto di vista termodinamico, delle soluzioni reali e dei processi che avvengono in soluzione, con specifici riferimenti a sistemi che prevedono organizzazione locale.

Contenuti:

Termodinamica delle soluzioni e dei processi in soluzione: aspetti sperimentali e relative modellistiche.

Soluzioni di anfifili. Soluzioni organizzate. Micelle. Chimica fisica dei sistemi dispersi e delle interfasi. Sistemi colloidali. Emulsioni e microemulsioni.

Obiettivi formativi in Inglese: Aim of the course is to provide students with methodological tools necessary to treat the thermodynamics of real solutions and of processes occurring in solution, with particular regards to systems undergoing local organization.

Thermodynamics of solutions and of processes occurring in solution: experimental aspects and related models. Solutions containing amphiphiles. Organized solutions. Micelles. Physical Chemistry of dispersed systems and interphases. Colloids. Emulsions and microemulsions.

**CFU**: 6

Reteirabilità: 1 Propedeuticità: No

Modalità di verifica finale: Esame orale

Lingua ufficiale: Italiano

#### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Termodinamica delle soluzioni, delle soluzioni organizzate e dei sistemi colloidali	6	CHIM/02 CHIMICA FISICA	J 3	lezioni frontali + esercitazioni

## Termodinamica Statistica (6 CFU)

Denominazione in Inglese: Statistical thermodynamics

Obiettivi formativi: Insiemi statistici. Equivalenza nel limite termodinamico e fluttuazioni.

Sistemi ideali (gas mono, bi- e poliatomico, reticolo ideale

Statistiche di Fermi e Bose. Sistemi (poco) fuori equilibrio. Risposta

lineare. Fluttuazione-dissipazione

Obiettivi formativi in Inglese: Ensembles. Fluctuations and equivalence of ensembles in the

thermodynamic limit. Ideal systems (mono, bi and polyatomic gases, ideal lattice). Quantum statistics. BE and FD statistics. Non equilibrium systems. Linear response theory. Fluctuation-dissipation theorem.

Reteirabilità: 1

Propedeuticità: Nessun obbligo di frequenza

Modalità di verifica finale: Esame

Lingua ufficiale: Italiano

### Moduli

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Termodinamica Statistica	6	CHIM/02 CHIMICA FISICA	Caratterizzanti	lezioni frontali

## Tesi e prova finale (42 CFU)

Denominazione in Inglese: Thesis

**CFU**: 42

Reteirabilità: 1

Modalità di verifica finale: Esame di laurea magistrale

Lingua ufficiale: Italiano

Denominazione	CFU	SSD	Tipologia	Caratteristica
Tesi e prova finale	39	NN No settore	Altre attività - prova finale	tirocinio
Altre conoscenze utili per l'inserimento nel mondo del lavoro	3	NN No settore	Altre attività - Altre conoscenze utili per l'inserimento nel mondo del lavoro	altro