

# **Corso di Laurea Magistrale in CHIMICA**

## **Obiettivi formativi**

La Laurea Magistrale in Chimica si propone la formazione di una figura professionale che possieda una solida preparazione culturale nei diversi settori della Chimica unita ad una elevata preparazione scientifica e operativa, una buona padronanza del metodo scientifico di base, una buona conoscenza degli strumenti matematici, fisici e informatici di supporto, una buona padronanza di almeno una lingua dell'Unione Europea oltre l'Italiano. Il laureato magistrale sarà in grado di impostare autonomamente il lavoro nell'ambito della Chimica di base e applicata, anche assumendo responsabilità di progetti o strutture. Tra le attività che il laureato magistrale è in grado di svolgere si indicano in particolare: attività di promozione e sviluppo dell'innovazione tecnologica, nonché gestione e progettazione delle tecnologie chimiche; attività professionali e di progetto in ambiti correlati con le discipline chimiche nei settori dell'industria, dei servizi, dell'ambiente, della sanità, dei beni culturali e della pubblica amministrazione.

## **Attività formative**

Il curriculum del corso di Laurea Magistrale in Chimica comprende attività formative finalizzate all'acquisizione di competenze avanzate in settori specifici della Chimica, che potranno essere sviluppate soprattutto nel periodo di preparazione di una tesi di carattere sperimentale. Attività formative consistenti in lezioni ed esercitazioni di laboratorio, saranno dedicate alla conoscenza di metodiche sperimentali, alla elaborazione dei dati con sistemi informatici, all'uso di strumentazione avanzata. Sarà possibile svolgere tirocini formativi presso aziende, strutture della pubblica amministrazione e laboratori, nonché, su obiettivi specifici, arricchire la formazione culturale e scientifica con soggiorni presso Università italiane e europee, anche nel quadro di accordi internazionali.

## **Percorsi formativi previsti**

Lo studente potrà sviluppare un piano di studi personalizzato costruito sulla base della offerta formativa dal corso di Laurea Magistrale in Chimica.

Tale percorso formativo dovrà comunque essere approvato dal Consiglio di Corso di Laurea secondo l'Ordinamento Didattico vigente.

## **Sbocchi professionali**

Il laureato magistrale in Chimica potrà accedere a Dottorati di Ricerca o a Corsi di Specializzazione nello specifico settore. Il laureato magistrale in Chimica potrà essere inserito nell'industria chimica, farmaceutica, ecc., con mansioni dirigenziali o di alta qualificazione professionale. Potrà inoltre essere inserito nei settori di ricerca presso enti pubblici o privati nonché nei settori Ambientali, dei Beni Culturali, Sanità ecc.

Potrà accedere all'insegnamento negli istituti di istruzione secondaria secondo la normativa vigente.

## **Iscrizione e debiti formativi**

La didattica è articolata per ciascun anno di corso in due cicli di lezioni. Nell'AA 2012/2013, le lezioni del 1° ciclo avranno inizio il 1 ottobre 2012 e avranno termine il 18 gennaio 2013; le lezioni del 2° ciclo avranno inizio il 4 marzo 2013 e avranno termine il 14 giugno 2013. Altre informazioni sul corso di Laurea Magistrale in Chimica possono essere reperite sulla pagina web del Consiglio di Corso di Laurea in Chimica ([www.scienze.uniroma2.it](http://www.scienze.uniroma2.it)).

Per iscriversi alla Laurea Magistrale in Chimica è necessario essere in possesso di una Laurea triennale in ambito scientifico. I laureati triennali in tutti i corsi di laurea della Classe Chimica, che abbiano aderito al programma Core Chemistry, potranno immatricolarsi senza ulteriori obblighi formativi. Per i possessori di Laurea equivalente conseguita all'estero oppure di Laurea in altro ambito scientifico, il Consiglio di Corso di Laurea stabilirà le modalità di accesso e l'assegnazione di eventuali obblighi formativi, dopo aver analizzato il curriculum universitario del candidato.

### **Piani di studio**

Il CCS approva all'inizio di ogni anno accademico i piani di studio proposti dagli studenti in conformità all'Ordinamento Didattico del Corso di Laurea.

## **Ordinamento degli Studi - Laurea Magistrale**

### **I°Anno I SEMESTRE**

#### **Attività fondamentali**

Meccanismi di reazione in Chimica Organica	(CHIM/06)	6 CFU
Chimica Inorganica Avanzata	(CHIM/03)	6 CFU
Chimica Analitica Applicata	(CHIM/01)	8 CFU
Metodi Matematici per la Chimica	(MAT/05)	6 CFU

#### **Offerta didattica complementare**

Catalisi	(CHIM/03)	6 CFU
----------	-----------	-------

### **I°Anno II SEMESTRE**

#### **Attività fondamentali**

Spettroscopia Molecolare	(CHIM/02)	8 CFU
Biochimica e Laboratorio	(BIO/10)	8 CFU

#### **Offerta didattica complementare**

Chimica Fisica Biologica	(CHIM/02)	6 CFU
Chimica Macromolecolare	(CHIM/02)	6 CFU
Chimica dei Materiali	(CHIM/03)	6 CFU
Chimica Teorica	(CHIM/02)	6 CFU
Spettroscopia NMR delle molecole organiche	(CHIM/06)	6 CFU

### **2°Anno I SEMESTRE**

#### **Attività fondamentali**

Chimica e Applicazioni di Materiali Molecolari	(CHIM/07)	6 CFU
--	-----------	-------

#### **Offerta didattica complementare**

Chimica degli Alimenti	(CHIM/10)	6 CFU
Chimica Analitica Clinica	(CHIM/01)	6 CFU
Chimica Elementoorganica	(CHIM/06)	6 CFU
Chimica dello Stato Solido	(CHIM/03)	6 CFU
Enzimologia	(BIO/10)	6 CFU

Materiali Nanostrutturati	(CHIM/03)	6 CFU
Sintesi asimmetrica	(CHIM/06)	6 CFU

## 2°Anno II SEMESTRE

### **Offerta didattica complementare**

Chimica delle Biomolecole	(BIO/10)	6 CFU
Chimica Combinatoria e Drug Design	(BIO/10)	6 CFU
Chimica Elettroanalitica	(CHIM/01)	6 CFU
Nanoscienze	(CHIM/02)	6 CFU

## Programmi dei corsi

### **BIOCHIMICA E LABORATORIO (BIO/10)**

8 CFU

#### **Prof. M. Paci**

Il corso si svolgerà con lezioni teoriche ed esercitazioni pratiche in laboratorio. Saranno affrontati i seguenti argomenti: aspetti generali della cellula, acidi nucleici e codice genetico, replicazione e trascrizione del DNA, sintesi e degradazione proteica negli eucarioti, aminoacidi e proteine, struttura e funzione delle proteine, motivi strutturali delle proteine, proteine di membrana, trasduzione del segnale ormonale, sistemi sensoriali (trasduzione del segnale visivo), contrazione muscolare, morte cellulare programmata e target proteici per la terapia del cancro, cenni sulla replicazione virale e sulle proteine virali come target terapeutici, matrice extracellulare e cenni di ingegneria tissutale.

Panoramica sulle tecniche di DNA ricombinante: estrazione ed amplificazione del DNA (PCR), sequenziamento DNA, produzione di proteine ricombinanti, tecniche per lo studio dell'espressione genica (Western blott, Microarray), tecniche cromatografiche per la purificazione delle proteine (cromatografia d'affinità, a gel filtrazione, ad interazione idrofoba, a scambio ionico, a fase inversa, sistemi cromatografici HPLC, FPLC), tecniche elettroforetiche per lo studio delle macromolecole biologiche (elettroforesi nativa in gel di poliacrilammide, SDS-PAGE, elettroforesi in gel d'agarosio, isolettrofocusing, elettroforesi capillare). Utilizzo di banche dati e di programmi per la ricerca di similarità e per la predizione delle strutture secondaria e terziaria delle proteine.

### **CATALISI (CHIM/03)**

6 CFU

#### **Prof. P. Tagliatesta**

##### *Concetti generali*

I complessi dei metalli di transizione. Teorie VB ed MO applicate ai complessi. Complessi organometallici. Regola dei 18 elettroni e sue deroghe. Gli idruri: preparazioni ed uso.

I composti carbonilici: preparazioni ed uso. I composti alchilici: preparazioni e reazioni.

Le fosfine: uso e caratteristiche. Reazioni di sostituzione di ligando. Addizione ossidativa e meccanismi. Eliminazione riduttiva. Accoppiamento ossidativo ed estrusione riduttiva. Inserzioni E1 ed E2. le eliminazioni a, b, g, d. Addizioni ed eliminazioni nucleofile ed elettrofile. Composti polienici e polienilici.

##### *Catalisi omogenea industriale*

Catalizzatori solubili ed insolubili. Reazioni organometalliche. Idrogenazione selettiva. Idrogenazione stereoselettiva: meccanismo. Idrosililazione e idrocianazione. Isomerizzazione di alcheni. Polimerizzazione di alcheni. Oligomerizzazione di alcheni. Polimerizzazione ed oligomerizzazione di dieni lineari. Processo water shift gas. Idrocarbonilazione di alcheni.

Carbossilazione di Reppe. Carbonilazione di alcoli. processo Monsanto. Idrogenazione di CO.

Carbonilazione dell'ammoniaca. Accoppiamento ossidativo di CO. Reazione di Fisher-Tropsch.

Processo Wacker. Epossidazione di alcheni.

##### *Catalisi eterogenea*

Adsorbimento e chemisorbimento. Catalisi industriale per la idrogenazione e la sintesi della ammoniaca. Meccanismo.

**CHIMICA DEGLI ALIMENTI (CHIM/10)**

6 CFU

**Prof. M. Paci***Mutuato dall'insegnamento di "Chimica degli Alimenti" cdl in Scienze della Nutrizione Umana***CHIMICA ANALITICA APPLICATA (CHIM/01)**

8 CFU

**Prof. G. Palleschi***Equilibri in soluzione**Equilibri Acido Base*

Dissociazione acidi e basi deboli

Forza ionica

Tamponi

Risoluzione di problemi applicati agli equilibri acido base

*Equilibri di precipitazione*

Solubilità, prodotti di solubilità

Precipitazione frazionata e applicazioni in chimica analitica

Combinazioni di costanti di equilibrio

Risoluzione di problemi applicati agli equilibri di precipitazione

*Equilibri di complessazione*

Costanti di stabilità

Effetto della complessazione sulla solubilità

Effetto del pH

Risoluzione di problemi applicati agli equilibri di complessazione

*Equilibri di ossidoriduzione*

Potenziali elettrodi

Fattori che influenzano il potenziale

Equazione di Nernst

Celle galvaniche

Costanti di equilibrio redox

Applicazione dei potenziali standard e dell'equazione di Nernst

Risoluzione di problemi applicati agli equilibri redox.

**ESERCITAZIONI**

Esercitazioni di laboratorio su tecniche strumentali analitiche utilizzate per le attività di ricerca ove si evidenziano gli studi degli equilibri descritti. (ripassare le tecniche strumentali studiate ad analitica 3)

Preparazione di una tesina sulle esercitazioni svolte da portare all'esame insieme al programma teorico

**CHIMICA ANALITICA CLINICA (CHIM/01)**

6 CFU

**Prof.ssa D. Moscone****CHIMICA DELLE BIOMOLECOLE (BIO/10)**

6 CFU

*da definire***CHIMICA COMBINATORIALE E DRUG DESIGN (BIO/10)**

6 CFU

**Dr.ssa A. Topai**

1) Drug Target

-Enzimi

-Recettori....

2) Principi di Farmacocinetica (ADMET)

3) Progettazione di SM (small molecules)

-Relazioni Struttura-Attività SAR,

-Interazione drug-target

- Definizione di Farmacoforo,
  - Isosteria/Bioisosteria
  - Strategie di lead optimization (case histories)
- 4) Computer Aided Drug Design (CADD)
- Costruzione di Modelli Farmacoforici
  - Docking
  - Homology modeling
  - Virtual screening of database
  - QSAR
  - Valutazione/predizione delle proprietà ADMET in silico
- 5) Approccio combinatoriale al Drug Discovery

## **CHIMICA DEI MATERIALI (CHIM/03)**

6 CFU

**Dr. R. Polini**

*Mutuato dall'insegnamento di "Chimica dei Solidi II" cdl in Scienza e Tecnologie dei Materiali*

### Parte generale:

Strutture cristalline.

Solidi cristallini. Reticoli di Bravais. Indici di Miller. Strutture cristalline dei materiali metallici. Strutture compatte (fcc, hcp). Strutture dei solidi ionici. Strutture di CsCl, NaCl, ZnS, fluorite, spinelli, perovskiti.

Difetti. Difetti puntuali. Conducibilità ionica. Elettroliti solidi. Difetti di linea: dislocazioni, vettore di Burgers, sistemi di scorrimento, interazioni tra dislocazioni, interazioni dislocazioni-difetti puntuali.

Difetti di superficie: difetti di impilamento (stacking faults), geminazione (twins), bordi di grano, bordi di grano a basso angolo. Difetti di volume: inclusioni, precipitati, porosità.

Proprietà meccaniche dei materiali. Comportamento elastico lineare. Modulo di Young. Coefficiente di Poisson. Curva sforzo-deformazione: snervamento, deformazione plastica, incrudimento, carico di rottura, duttilità. Tenacità. Resilienza.

Durezza. Meccanismi di rafforzamento dei materiali metallici. Legge di Hall-Petch. Fatica. Scorrimento viscoso (creep).

*Case study:* l'evoluzione delle palette di turbina per motori a reazione.

Proprietà meccaniche dei materiali ceramici. Frattura fragile. Teoria di Griffith.

Comportamento a frattura in termini statistici (Weibull). Materiali polimerici. Polimeri amorfi e semi-cristallini. Temperatura di transizione vetrosa. Comportamento viscoelastico

Reticolazione (cross-linking).

### Parte specialistica:

Processi di sinterizzazione di polveri: principi fondamentali. Equazione di Laplace. Stadi della sinterizzazione. Evoluzione della microstruttura. Tecniche di misura del grado di avanzamento della sinterizzazione. Additivi di sinterizzazione: principi di funzionamento. Sinterizzazione con fase liquida.

Diagramma di German. Processi di sinterizzazione *pressure-assisted*.

*Case study:* la sinterizzazione del carburo di tungsteno cementato (WC-Co).

Rivestimenti avanzati da fase vapore. Processi di deposizione fisica (PVD):

evaporazione, sputtering, magnetron sputtering, processi ad arco, arco filtrato. Processi di deposizione chimica da vapore (CVD). CVD termico, CVD assistito da plasma, Hot Filament CVD. Parametri di processo, microstruttura dei rivestimenti e proprietà.

*Case study:* deposizione di film di diamante micro-e nano-strutturati.

Materiali ceramici per celle a combustibile a ossidi solidi(SOFC): scelta, proprietà e processing.

## TESTI CONSIGLIATI

Agli studenti saranno fornite copie dei lucidi proiettati a lezione. Gli studenti possono integrare la preparazione mediante la consultazione dei seguenti testi:

### Parte generale

William D. Callister, Jr., "Scienza e Ingegneria dei materiali. Una Introduzione"; EdiSES, Napoli (2002).

William F. Smith, "Scienza e tecnologia dei materiali"; McGraw-Hill Libri Italia srl, Milano (1995).

Anthony R. West, "Solid State Chemistry and its applications", John Wiley & Sons, UK (1984).

### Parte specialistica

Randall M. German, "Sintering theory and practice", John Wiley & Sons, Inc., USA (1996).

Milton Ohring, "Material Science of Thin Films. Deposition and Structure", Academic Press, San Diego (CA), USA (2002).

Roitan F. Bunshah, "Handbook of Deposition Technologies for Films and Coatings.

Science, Technology and Applications", 2<sup>a</sup> edizione, Noyes Publications, Westwood (New Jersey), USA (1994).

N. Q. Minh, "Ceramic Fuel Cells", J. Am. Ceram. Soc., 76(1993) 563-588.

### **CHIMICA DELLO STATO SOLIDO (CHIM/03)**

6 CFU

*mutuato dall'insegnamento di "Chimica dei Solidi con lab." cdl in Scienza e Tecnologie dei Materiali*

#### **Prof. M. Tomellini**

Reticoli cristallini. Reticolo reciproco. Indici di Miller. La diffrazione dei raggi X: formule di Bragg e di Von Laue. Intensità di diffrazione. Diffrazione da un reticolo con base. Proprietà termiche dei solidi. Equazione di stato. Coesione dei solidi ionici, dei metalli e dei cristalli di gas nobili. Stabilità delle strutture di: NaCl, CsCl e ZnS. Termodinamica dei difetti di punto. Equilibri tra difetti e reazioni gas-solido. Ossidi semiconduttori. Trasporto di materia nei solidi. Leggi di Fick. Equazioni di trasporto generalizzate. Coefficiente di diffusione chimico. Equazione di Nernst-Einstein. Sensori elettrochimici a stato solido. Cinetica di ossidazione dei metalli. Teoria di Wagner.

### **CHIMICA E APPLICAZIONI DI MATERIALI MOLECOLARI (CHIM/07)**

6 CFU

#### **Prof. R. Paolesse**

### **CHIMICA ELETTROANALITICA (CHIM/01)**

6 CFU

#### **Prof.ssa D. Moscone**

Il corso fornisce agli studenti un approfondimento delle conoscenze di chimica elettroanalitica acquisite nei precedenti corsi di chimica analitica. Saranno affrontati i principi teorici alla base delle tecniche amperometriche, polarografiche, voltammetriche e potenziometriche,. Verranno discusse le principali tecniche utilizzate nelle analisi quantitative con particolare riferimento ad applicazioni pratiche. Il corso sarà affiancato da alcune esercitazioni in laboratorio.

### **CHIMICA ELEMENTO ORGANICA (CHIM/06)**

6 CFU

#### **Prof.ssa B. Floris**

Il corso presenterà gli aspetti più significativi e più recenti della Chimica Organica dei metalli del "main group" (Composti organici di litio, magnesio, zinco, boro, silicio e stagno), dei metalli di transizione (Composti organici di rame, titanio, ferro, palladio e lantanidi) e di elementi come zolfo, selenio e fosforo.

### **CHIMICA INORGANICA AVANZATA (CHIM/03)**

6 CFU

*da definire*

-Proprietà dei metalli di transizione e dei loro composti. Gli elementi dotati di elettroni di valenza d e f.

-I composti dei metalli di transizione. Teoria del campo cristallino. Teoria del campo dei ligandi. Il legame  $\pi$  nei metalli di transizione. Il legame nei clusters.

-I composti donatore-accettore dei metalli di transizione. Numero di coordinazione e geometria di coordinazione. Numero di coordinazione e regola dei 18 elettroni. Stabilità nei complessi metallici. Ligandi e complessi comuni. Isomeria nei complessi metallici. Sistemi stereochimicamente non rigidi.

- Composti covalenti dei metalli di transizione. Classi di composti covalenti. Metallocarbonili. Metallo nitrosili. Sistemi organometallici: donatori di elettroni  $\pi$ . legame intermetallico. Clusters metallici. Teoria del legame nei clusters.

-Reazioni tra i complessi dei metalli di transizione. Sostituzione di ligandi. Sostituzione di ligandi in complessi ottaedrici e piani quadrati. Reazioni di ossidoriduzione. Correlazione tra struttura e reattività. Reazioni di addizione ossidativa.

-Molecole e meccanismi bioinorganici

Elementi inorganici nei sistemi biologici. Cenni sui principali metodi di indagine nella ricerca bioinorganica

Biochimica dello zinco: Zn nei sistemi viventi; principali enzimi (carbossipeptidasi A, fosfatasi alcalina, anidrasi carbonica); complessi modello.

Biochimica del ferro: principali funzioni biologiche; trasporto e immagazzinamento del Fe e di O<sub>2</sub>; trasferimenti elettronici e processi enzimatici.

Biochimica del rame: trasporto di O<sub>2</sub> (emocianine) e funzioni redox. Metallo-enzimi protettori (Cu,Zn-superossido dismutasi).

Biochimica del Mo e W: trasferimenti di O e attivazione dell'N.

Biochimica del manganese. Aspetti catalitici (Mn-SOD) e fotosintesi.

Biochimica del cobalto: vitamina B12.

Ruolo biologico degli elementi del primo e secondo gruppo

Cenni di chimica tossicologica di metalli (Cd, Hg e Pb) e non metalli.

Composti metallici nella terapia e nella diagnostica: composti antitumorali a base di Pt (cisplatino) e antiartritici (Au). Metalli nella radiodiagnostica (<sup>99m</sup>Tc) e radioterapia.

### **CHIMICA FISICA BIOLOGICA (CHIM/02)**

6 CFU

**Prof. A. Palleschi**

Proprietà strutturali di biopolimeri.

Transizioni *helix-coil* in polipeptidi ed in proteine.

Modelli di *binding*: non cooperativo e cooperativo.

Catalisi enzimatica: modelli interpretativi; cinetiche iperboliche; cinetiche sigmoidali.

Approfondimenti: processi diffusivi; stechiometria di *binding* (Job's Plot).

Termodinamica dei processi irreversibili: principi generali; relazioni di Onsager; processi accoppiati; ordine generato da processi lontani dall'equilibrio.

### **CHIMICA MACROMOLECOLARE (CHIM/02)**

6 CFU

**Prof. G. Paradossi**

*Mutuato dall'insegnamento di "Chimica delle Macromolecole" cdl in Scienza e Tecnologie dei Materiali*

Classificazioni. Peso molecolare e sua distribuzione. Temperatura di transizione vetrosa. Meccanismo di polimerizzazione a stadi. Nylons e poliesteri. Teoria di Carothers. Meccanismi a catena. Polimeri vinilici. Tecnologie di polimerizzazione radicalica. Tatticità. Il problema della conformazione media di una catena disordinata. Distribuzione gaussiana. Rappresentazione vettoriale di una catena polimerica disordinata. Rapporto caratteristico. Elemento di Kuhn. Termodinamica del mescolamento di soluzioni polimeriche. Teoria di Flory – Huggins. Precipitazione frazionata. Frazionamento per esclusione di dimensioni. Pressione osmotica. Fluttuazioni termodinamiche in soluzioni polimeriche. Teoria di Rayleigh. Light Scattering e dipendenza angolare. Light scattering dinamico. Termodinamica dell'elastomero e teoria dell'elasticità.

Testo consigliato: R. J. Young and P. A. Lovell *Introduction to Polymers*. CRC Ed.

Dispense di "Chimica delle Macromolecole"

### **CHIMICA TEORICA (CHIM/02)**

6 CFU

*da definire*

Stati fisici ed osservabili in meccanica classica e meccanica quantistica; gli stati quantistici e gli operatori; la rappresentazione delle coordinate e l'uso di basi discrete; le equazioni di Schroedinger e l'equazione di Dirac; distribuzioni di equilibrio e gli ensemble meccanico-statistici; le basi della meccanica statistica di equilibrio; approssimazione Born-Oppenheimer; equazioni del moto e spazio delle fasi; teoria delle perturbazioni e basi della dinamica molecolare; calcoli meccanico-statistici e dinamica molecolare; meccanica statistica di non equilibrio nel regime lineare; trattazione dei processi di assorbimento ed emissione dei fotoni; la teoria del complesso attivato; introduzione ai calcoli misti classico-quantistici.

**ENZIMOLOGIA (BIO/10)**

6 CFU

**Prof.ssa Caccuri**

Obiettivi: Il corso sarà articolato in lezioni frontali ed esperienze pratiche e tratterà dei seguenti argomenti: Catalisi enzimatica: aspetti termodinamici, flessibilità proteica, catalisi acida e basica generale, elettrostatica, covalente. Cinetica enzimatica dello stato stazionario, dipendenza della catalisi enzimatica dal pH e dalla temperatura, reazioni ad uno e due substrati, inibitori enzimatici reversibili ed irreversibili. Cooperatività e regolazione enzimatica. Cinetica dello stato pre-stazionario, determinazione delle costanti microscopiche di una reazione enzimatica. Meccanismo catalitico di alcuni enzimi. Esercitazioni: misura dell'attività enzimatica e determinazione delle costanti  $k_{cat}$  e  $K_m$ . Determinazione del meccanismo di reazione in un sistema a due substrati. Effetto del pH sull'attività enzimatica, determinazione di gruppi ionizzabili essenziali per la catalisi. Interazione enzima-inibitore, determinazione del meccanismo di inibizione e della costante  $K_i$ .

**MATERIALI NANOSTRUTTURATI (CHIM/03)**

6 CFU

*Mutuato dall'insegnamento "Materiali Nanostrutturati per l'elettronica" cdl in Scienza e Tecnologie dei Materiali***Prof.ssa M.L. Terranova**

Introduzione alle Nanoscienze ed alle nanotecnologie : stato dell'arte e prospettive  
Nanomateriali e nanostrutture (0-D, 1-D e 2-D) .

- quantum dots
- nanoparticelle e nanopolveri
- nanocapsule
- materiali nanoporosi
- nanofili e nanofibre
- dendrimeri
- film sottili

Gli approcci : bottom-up e top-down.

Tecniche di preparazione : sintesi chimiche , processi fisici, trattamenti post-sintesi, tecniche litografiche

Caratterizzazioni, proprietà ed applicazioni di importanti classi di materiali, con particolare riferimento ai nanomateriali di Carbonio (grafene, fullereni, nanotubi) ed ossidi.

Nanomateriali per sensoristica

Nanomateriali per celle fotovoltaiche DSSC e plastiche

**MECCANISMI DI REAZIONE IN CHIMICA ORGANICA (CHIM/06)**

6 CFU

**Prof.ssa B. Floris**

Il corso presenterà gli aspetti più significativi e più recenti della Chimica Organica dei metalli del "main group" (Composti organici di litio, magnesio, zinco, boro, silicio e stagno), dei metalli di transizione (Composti organici di rame, titanio e palladio) e di elementi come zolfo, selenio e fosforo.

**METODI MATEMATICI PER LA CHIMICA (MAT/05)**

6 CFU

**Prof.ssa E. Prestini**

Spazi di Hilbert. Elementi di analisi complessa. Serie di Fourier. Applicazioni.

**NANOSCIENZE (CHIM/02)**

6 CFU

**Dr.ssa M. Scarselli**

Fondamenti teorici delle Nanoscienze. Microscopie a scansione ed elettroniche. Metodi di patterning top-down. Costruzione bottom-up di nanostrutture. Elettronica molecolare. Bionanotecnologie.

Il corso sarà integrato da esperienze di laboratorio e seminari su attività di ricerca nel campo delle nanoscienze.



## **SINTESI ASIMMETRICA (CHIM/06)**

6 CFU

**Prof.ssa V. Conte**

Introduzione al corso. Definizioni ed esempi di selettività. Metodi per controllare l'enantioselezione. Reazioni stereoselettive del carbonile e di alcheni. Risoluzione cinetica e risoluzione cinetica dinamica. Biocatalisi. Organocatalisi. Sintesi Asimmetrica Industriale.

Principi della catalisi metallica in processi selettivi.

Esempi di processi enantioselettivi metallo calizzati:

Reazioni di idroformilazione, idrogenazione, diidrossilazione, ossidazione, metatesi

## **SPETTROSCOPIA MOLECOLARE (CHIM/02)**

8 CFU

**Prof. L. Stella**

Spettroscopia di emissione

Spettroscopia risolta nel tempo

    Laser flash photolysis

    Tempi di vita di fluorescenza

    Anisotropia risolta nel tempo

Spettroscopia con luce polarizzata

    Dicroismo lineare

    Dicroismo circolare

    Anisotropia di fluorescenza

Spettroscopia di singola molecola

    Microscopia di fluorescenza

    Spettroscopia di singola molecola

    Fluorescence Correlation Spectroscopy

Elementi di strumentazione

    Lasers

    Monocromatori

    Rivelatori

Esperienze di laboratorio.

## **SPETTROSCOPIA NMR DELLE MOLECOLE ORGANICHE (CHIM/06)**

6 CFU

**Prof. D.O. Cicero**

Lo spin nucleare. Proprietà dello spin. Livelli energetici e transizioni. Diagramma di energia. Statistica di Boltzmann. La precessione. Processi di tipo T1 e T2. Il sistema ruotante. Impulsi di campo magnetico. Riassunto del chemical shift e costanti di accoppiamento scalare. Il segnale dipendente dal tempo. Frequenze positive e negative. La trasformata di Fourier. La correzione di fase. Il segnale digitale e la velocità di campionamento. L'esperimento "pulse and collect". Data processing.

Il formalismo degli operatori prodotto. Riassunto di meccanica quantistica. Gli operatori di spin. Hamiltoniani di impulsi e delay. Equazione di moto. Rotazioni standard. Esempio di calcolo usando gli operatori prodotto: la sequenza spin echo. Operatore di due spin. Evoluzione durante tempi ed impulsi. Evoluzione durante l'accoppiamento spin-spin.

Esperimenti di correlazione omonucleare basati sulla costante di accoppiamento scalare: COSY e TOCSY. Il trasferimento di magnetizzazione tramite la costante di accoppiamento: analisi di operatore prodotto. L'esperimento bidimensionale. L'esperimento COSY. Problemi legati all'esperimento COSY. Esperimento COSY a filtro quantico doppio (DQF-COSY). Termini di quanto multiplo. Operatori di rotazione. Calcolo dell'ordine della coerenza. Evoluzione dei termini a multiple quantum. Descrizione dell'esperimento DQF-COSY. Esperimento TOCSY: principio e applicazione.

Esperimenti di correlazione omonucleare basati sull'accoppiamento dipolare: NOESY e ROESY. L'effetto nucleare Overhauser (NOE). Diagrammi di energia per un sistema a due spin. L'origine del NOE. Il caso del sistema a due spin. La natura del rilassamento. Funzioni di correlazione e densità spettrale. Velocità di transizione e densità spettrale e tempo di correlazione. Dipendenza del NOE con il tempo di correlazione. NOE stato stazionario. Spettroscopia differenza. Spin diffusion. NOE transiente. L'esperimento NOESY. L'uso dello spin lock. Esperimento ROESY. Esempi e applicazioni.

Esperimenti di correlazioni eteronucleari. La sequenza DEPT: analisi con gli operatori prodotto. Gli spin echo per il caso eteronucleari: analisi. L'esperimento HSC a partire dal COSY omonucleare. Esperimenti con rilevamento diretto o indiretto: vantaggi e svantaggi. Gli esperimenti HSQC e HMQC. Uso dei gradienti per la selezione di coerenza. L'esperimento HMBC.

Esempi di risoluzione strutturale utilizzando dati di NMR bidimensionale omo- ed eteronucleare.