

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 dell'offerta formativa dal corso di Laurea Magistrale in Chimica.

Tale percorso formativo dovrà comunque essere approvato dal Consiglio di Dipartimento 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 2015/2016, le lezioni del 1° ciclo avranno inizio il 5 ottobre 2015 e avranno termine il 15 gennaio 2016; le lezioni del 2° ciclo avranno inizio il 7 marzo 2016 e avranno termine il 10 giugno 2016. Altre informazioni sul corso di Laurea Magistrale in Chimica possono essere reperite sulla pagina web del Corso di Laurea in Chimica (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 Dipartimento stabilirà le modalità di accesso e l'assegnazione di eventuali obblighi formativi, dopo aver analizzato il curriculum universitario del candidato.

Piani di studio

Il Consiglio di Dipartimento approva i piani di studio proposti dagli studenti in conformità all'Ordinamento Didattico del Corso di Laurea.

L'ottenimento della laurea magistrale necessita di ulteriori 120 CFU rispetto a quelli maturati nella laurea triennale, quindi non potranno essere inseriti nel piano di studi insegnamenti già sostenuti nella precedente carriera.

Si precisa che i due insegnamenti a scelta libera, indicati all'interno del piano di studi, conterranno nella media finale come un unico esame (con voto pari alla media dei singoli voti, pesati con i relativi crediti).

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
*(insegnamento erogato in lingua inglese)		
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	BIO/10	6 CFU

2°Anno I SEMESTRE

Attività fondamentali

E' possibile scegliere uno tra i seguenti insegnamenti:

Chimica e Applicazioni di Materiali Molecolari	CHIM/07	6 CFU
Chimica Farmaceutica	CHIM/08	6 CFU

Offerta didattica complementare

Biochimica del DNA	BIO/10	6 CFU
Chimica degli Alimenti	CHIM/10	6 CFU
Chimica Analitica Clinica	CHIM/01	6 CFU
Chimica dello Stato Solido	CHIM/03	6 CFU
Enzimologia	BIO/10	6 CFU
Nanoscienze	CHIM/02	6 CFU
Sintesi asimmetrica	CHIM/06	6 CFU

2°Anno II SEMESTRE**Offerta didattica complementare**

Chimica Combinatoria e Drug Design	BIO/10	6 CFU
Chimica Elettroanalitica	CHIM/01	6 CFU
Materiali Nanostrutturati	CHIM/03	6 CFU

Prova Finale 34 CFU

Programmi dei corsi

BIOCHIMICA DEL DNA – BIO/10 6 CFU
Docente da definire

BIOCHIMICA E LABORATORIO - BIO/10 8 CFU

Dott.ssa S. Melino 6 CFU

Dr. Bocedi 2 CFU

Durante il corso saranno affrontati i seguenti argomenti:

Caratteristiche generali delle Macromolecole Biologiche

Sintesi e Degradazione delle proteine negli organismi eucariotici

Struttura delle Proteine e Relazione Struttura/Funzione delle Proteine

Meccanismi molecolari alla base della Trasduzione del segnale ormonale, dei Sistemi sensoriali e della Contrazione Muscolare

Cenni sui meccanismi molecolari alla base della morte cellulare programmata e sui target terapeutici per le terapie antitumorali

Cenni sulla replicazione virale e sulle proteine virali come target terapeutici

Matrice extracellulare ed Ingegneria Tissutale

Tecniche di base per lo studio delle proteine, degli acidi nucleici e delle loro interazioni.

Laboratorio

Tecniche di DNA ricombinante applicate ai processi di espressione delle proteine. Esperienza sulle tecniche per la purificazione ed analisi delle proteine ricombinanti dopo espressione in batteri: cromatografia, elettroforesi, western-blot. Spettrofotometria. Cinetica enzimatica. Cenni di cristallografia a raggi X. Spettrometria di massa.

Basi di bioinformatica. Utilizzo delle banche dati per le macromolecole biologiche, accesso ad informazioni funzionali e strutturali. Utilizzo di algoritmi predittivi per la comparazione della struttura

primaria e terziaria delle proteine e per l'identificazione di domini/motivi strutturali e funzionali 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 ANALITICA APPLICATA* - CHIM/01

8 CFU

Prof. G. Palleschi

**(insegnamento erogato in lingua inglese)*

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

- I problemi delle analisi dei campioni clinici.
- Sangue: prelievo e conservazione, composizione. Bilancio acido-base. Bilancio idrico e misura di elettroliti. Analisi dei gas disciolti.
- Metodi Elettrochimici: applicazione di elettrodi ionoselettivi (pH, Na, K, CO₂) nelle analisi cliniche. Amperometria (Sensori ad O₂ e CO₂)
- Spettrofotometria di assorbimento ed emissione: esempi di determinazione di analiti di interesse clinico.
- Analisi per la funzione gastrica e pancreatica. Analisi di carboidrati. Biosensori.
- Analisi per la funzione epatica. Analisi di proteine. Metabolismo ed analisi del pigmento biliare.
- Analisi Enzimatica. Cinetica enzimatica, effettori ed inibitori enzimatici. Specificità enzimatica e classificazione. Metodi e test enzimatici semplici ed accoppiati. Misurazione dell'attività enzimatica per via spettrofotometrica: test accoppiati. Esempi di determinazione di analiti di interesse clinico.
- Tecniche separative in campo clinico: Elettroforesi. HPLC
- Analisi di lipidi.
- Analisi per la funzione renale. Tests di Clearance. Analisi dell'urina.
- Immunochimica. Antigeni, Anticorpi. Immunodiffusione. Immunolettroforesi. ELISA.
- Statistica. Attendibilità delle analisi. Limiti di confidenza e Valori normali. Controllo di qualità. Controllo degli strumenti e delle soluzioni
- Tecniche di biologia molecolare: PCR
- Automazione in Chimica Clinica

Testi Consigliati

Spandrio: *Manuale di laboratorio, vol. I*, Ed. PICCIN

N.W. Tiez: *Principi di chimica clinica*, ed. PICCIN

CHIMICA COMBINATORIALE E DRUG DESIGN - BIO/10

6 CFU

Dr.ssa A. Topai

Principi base del processo di Drug Discovery

Drug Target

-Enzimi

-Recettori

Principi di Farmacocinetica (ADMET)

Progettazione di SM (small molecules)

-Relazioni Struttura-Attività SAR,

-Interazione drug-target

-Definizione di Farmacoforo,

-Isosteria/Bioisosteria

-Strategie di lead optimization (case histories)

Computer Aided Drug Design (CADD)

-Costruzione di Modelli Farmacoforici

-Docking

-Homology modeling

-Virtual screening of database

-QSAR

-Valutazione/predizione delle proprietà ADMET in silico

Approccio combinatoriale al Drug Discovery

CHIMICA DEGLI ALIMENTI - CHIM/10

6 CFU

Prof. M. Paci

Gli studenti di Chimica Magistrale negli argomenti del corso devono approfondire particolarmente i meccanismi delle reazioni e le influenze dei parametri chimico fisici sul loro decorso e sulla loro velocità. Una particolare attenzione va sempre rivolta al ruolo dell'acqua e al suo effetto sul comportamento chimico dei sistemi e nelle tessiture alimentari. Il calore e il pH sono i parametri che influenzano il

decorso nelle reazioni degli alimenti e sull' ' effetto degli additivi. Tali aspetti dovranno essere opportunamente approfonditi.

lez-1 Gli alimenti e la loro conservazione.

Gli alimenti, la banca dati INRAN. I meccanismi di alterazione degli alimenti, la perossidazione . La conservazione degli alimenti. I metodi di conservazione. Il ruolo dell' ' acqua e dell' ' umidità' nella conservazione degli alimenti, le acque minerali , Acqua e soluti idrofili e idrofobi. Gli alimenti della quarta gamma. Cenni su emulsioni e schiume. Il latte ed i prodotti lattiero-caseari. La determinazione del latte. Il latte materno e quello animale. Il latte di varie specie e il latte di soia. I fitoestrogeni ed il Danacol. La proteolisi. I peptidi bioattivi . Il formaggio. La cagliata e il caciofiore del Lazio.

Lez-2 Le fibre alimentari.

Le fibre alimentari. I polisaccaridi amidi cellulose, carboidrati algali come alimento e come additivi per la conservazione degli alimenti e il loro rapporto con l' ' acqua. Amilosio ed amilopectina. La natura cristallina dell' ' amido. Il rapporto proteina- acqua. Il glutine, le gliadine e le glutenine nel pane ecc. La pasta. La pasta di grano duro.

Lez-3 I grassi.

I grassi alimentari: burro, olio e margarina. Margarine commerciali. La loro idrogenazione. Gli acidi grassi essenziali.

Lez-4 La carne e le proteine.

Le proteine per l' ' alimentazione , la carne , gli aminoacidi. Gli aminoacidi essenziali, la carne, le uova, la carne simmenthal , la mortadella, il surimi. L' ' uso delle transglutaminasi.

Lez-5 Gli additivi degli alimenti.

Gli additivi tecnologici, additivi per il gusto e a finalità nutrizionale. gli additivi gelificanti, addensanti e emulsionanti. I fluidi a viscosità supercritica. La mayonese. I dolcificanti naturali e di sintesi. L' ' effetto termico sull' ' aspartame. I coloranti naturali e di sintesi. I detergenti e i fosfolipidi. Le proteine dolcificanti e la stevia. Gli additivi gelificanti , addensanti, emulsionanti. Gli aromi naturali e di sintesi. Il gusto dolce e l' ' olfatto. L' ' umami e il glutammato. Il peperoncino e la scala Scoville. Il DB dei flavonoidi.

Lez-6 Le estrazioni

Le estrazioni chimiche , i succhi di frutta e le estrazioni con solventi. La tecnica della CO₂ supercritica. Il vino ed il non vino.

Decaffeinato , decaffeinato e licopene.

Lez-7 L' ' imbrunimento degli alimenti e la cottura dei cibi.

L' imbrunimento enzimatico degli alimenti , la caramellizzazione.

La cottura dei cibi e la reazione di Maillard, il meccanismo della reazione, la furfuroloina e sua misura, le Melanoidine, le ammine aromatiche, la mutagenicità delle ammine aromatiche. Il test di Ames sulla mutagenicità dei composti aromatici. L' ' acroleina nei fritti e l' ' acrilammide. La Reazione di Maillard nella carne e nei fritti e nella essiccazione della pasta. La reazione di Maillard nel latte. Gli aspetti nutrizionali della reazione di Maillard nei prodotti da forno.

Gli affumicati e i PHAs(o IPA)

Lez-8 Lo studio e la caratterizzazione degli alimenti.

Le bevande . Il vino legale e quello non consentito , la birra , le bevande nervine e la Redbull.

Lez-9 La tracciabilità.

Il problema delle frodi e della provenienza geografica. I metodi Chemiometrici e i metodi isotopici. Il trattamento statistico dei dati.

Testi Consigliati:

E. Marchese, P. Mattioli, M. Paci, "Alimenti Nutrizione e dieta mediterranea", Ed. (2013)

P. Cappelli, V. Vannucchi, "Chimica degli Alimenti, conservazione e trasformazioni", Zanichelli (2000)

CHIMICA DEI MATERIALI- CHIM/03

6 CFU

Dr. R. Polini

Parte generale

I - 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, titanite, spinelli, perovskiti. Difetti. Difetti puntuali. Conduttività 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.

2 - 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. Materiali compositi. Proprietà meccaniche dei compositi. Condizioni di isosforzo e isodeformazione per compositi con fibre continue allineate. Compositi rinforzati con particelle. Cermet. Compositi a matrice metallica (MMC).

Parte specialistica

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

4 - 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.

5 - Materiali per celle a combustibile a ossidi solidi (SOFC) e polimeriche (PEMFC): scelta, proprietà e processing degli elettrodi e dell'elettrolita.

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^a edizione, Noyes Publications, Westwood (New Jersey), USA (1994).

CHIMICA DELLO STATO SOLIDO - CHIM/03

6 CFU

(insegnamento fruito dal corso di laurea in cdl in Scienza dei Materiali)

Prof. M. Tomellini

Reticoli cristallini. Diffrazione dei raggi X e determinazione delle strutture cristalline. Calore specifico dei solidi. Espansione termica. Compressibilità. 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. Diffusione. Il "random walk". Equazioni di trasporto generalizzate. Coefficiente di diffusione chimico. Equazione di Nernst-Einstein. Sensori elettrochimici a stato solido. Ossidazione dei metalli, diagramma di Ellingham. Cinetica di ossidazione dei metalli. Teoria di Wagner.

Testi Consigliati

R.J. Borg, G.J. Dienes: "The physical Chemistry of solids" Academic Press
H. Ibach, H. Lüth "Solid state physics: an introduction to principles of materials science", Springer
M. Tomellini "Appunti di chimica fisica dello stato solido" Aracne Editrice "

CHIMICA E APPLICAZIONI DI MATERIALI MOLECOLARI - CHIM/07 **6 CFU**

Prof. R. Paolesse

(insegnamento fruito dal corso di laurea in Chimica Applicata)

Nanotecnologia e materiali molecolari: caratteristiche delle nanostrutture. Come realizzare nanostrutture: approccio top-down e bottom-up. Fotolitografia. Principi di chimica supramolecolare: Riconoscimento molecolare. Principali classi di materiali molecolari: polimeri; calixareni; cavitandi; porfirinoidi.

Tecniche di deposizione in film sottile di materiali molecolari: spray e spin coating; Film di Langmuir-Blodgett e Langmuir-Schaefer; monostrati autoassemblati. Self-assembling e self-organization. Cenni sulle principali tecniche di caratterizzazione di tali film.

Esempi di applicazioni di materiali molecolari:

OLED; celle fotovoltaiche organiche; Sensori chimici

CHIMICA ELETTROANALITICA - CHIM/01 **6 CFU**

Prof. F. Ricci

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.

Testi Consigliati

Dispense fornite dal docente

J. Wang, "Analytical Electrochemistry"

A.J. Bard, L.R. Faulkner "Electrochemical Methods"

CHIMICA FARMACEUTICA – CHIM/08 **6 CFU**

Prof. D.O. Cicero

Identificazione di un target farmacologico all'interno di un area terapeutica. Metodi di identificazione di hit compounds e saggi primari. Creazione di un screening funnel. Saggi secondari ortogonali e biomarcatori.

Introduzione alla Chimica Medicinale. I problemi della chimica medicinale: soluzioni. Case studies: sviluppo di un farmaco anti-HIV basato su un nuovo meccanismo: ISENTRESS. La proteasi NS3 del HCV: da un target non conveniente all'efficacia clinica.

Peptidi naturali. Sviluppo di nuovi candidati peptidici. Metodi sintetici e di caratterizzazione di peptidi. Peptidi ad attività biologica. Sviluppo di peptidi terapeutici. Esempi di farmaci peptidici.

Introduzione alla ricerca farmaceutica. Farmacocinetica. Metodi in DMPK. Metabolismo dei farmaci ed escrezione. Fattori che alterano il metabolismo dei farmaci e l'assorbimento. Ruolo del metabolismo nella tossicità dei farmaci.

Metabolomica. Tecniche e concetti. Acquisizione di dati e assegnazione di metaboliti. Elementi di analisi multivariata: PCA, PLS, PLS-DA. Scoring e loading plots. La metabolomica nel drug discovery. Ricerca di biomarcatori tramite profile metabolici.

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.

Testi Consigliati

B. Pispisa: Chimica Fisica Biologica, VI Ed., Aracne Editrice

A. Palleschi: Appunti di Chimica Fisica Biologica

CHIMICA INORGANICA AVANZATA - CHIM/03

6 CFU

Dott.ssa C. Crestini

-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 π 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 π . 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 O₂; trasferimenti elettronici e processi enzimatici.

Biochimica del rame: trasporto di O₂ (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 (^{99m}Tc) e radioterapia.

Testi Consigliati

Porterfield, W. Chimica Inorganica. Zanichelli

CHIMICA MACROMOLECOLARE - CHIM/02

6 CFU

Prof. G. Paradossi

(insegnamento fruito dal corso di laurea in cdl in Scienza dei Materiali)

Cenni storici sulle macromolecole. Definizioni. Caratteristiche e proprietà delle macromolecole. Grado di polimerizzazione. Temperatura di transizione vetrosa Distribuzione dei pesi molecolari.. Peso molecolare medio numerico e ponderale. Indice di polidispersione. Polielettroliti. Gel

Polimerizzazioni con meccanismo a catena e a stadi. Teoria di Carothers. Approccio statistico per la polimerizzazione a stadi. Studio cinetico della polimerizzazione radicalica. Lunghezza cinetica di catena. Polimerizzazione pseudo vivente. Temperatura di Ceiling. Aspetti tecnologici della polimerizzazione a catena. Polimeri atattici, isotattici, sindiotattici e loro proprietà fisiche e chimiche. Conformazione di catene disordinate: a) approccio statistico, b) approccio vettoriale. Termodinamica di soluzioni polimeriche. Frazioni in volume. Condizioni Theta. Condizioni critiche. Metodi di frazionamento: precipitazione frazionata, cromatografia a permeazione di gel. Soluzioni diluite. Pressione osmotica. Diffusione della luce statica e dinamica (cenni). Determinazione di dimensione medie di macromolecole in soluzione. Elastomeri (aspetti strutturali e termodinamici). Gomma entropica. Teoria dell'elasticità.

Testi Consigliati

Introduction to Polymers, R.J. Young, P.A. Lovell CRC press

CHIMICA TEORICA - CHIM/02**6 CFU****Dott. A. Amadei**

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**

Catalisi enzimatica: aspetti termodinamici, flessibilità proteica, catalisi acida e basica generale, catalisi elettrostatica e covalente. Cinetica enzimatica dello stato stazionario, reazioni ad uno o più substrati; dipendenza della catalisi enzimatica dal pH e dalla temperatura. Inibitori enzimatici reversibili ed irreversibili. Cooperatività e regolazione enzimatica. Cinetica dello stato pre-stazionario.

MATERIALI NANOSTRUTTURATI - CHIM/03**6 CFU***(insegnamento fruito dal corso di laurea in 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

Testi Consigliati

M.Ashby, P.Ferreira,D.Schodek,, Nanomaterials, Nanotechnologies and Design , Elsevier

MECCANISMI DI REAZIONE IN CHIMICA ORGANICA - CHIM/06**6 CFU****Prof.ssa B. Floris**

Il corso presenta gli strumenti teorici e pratici per affrontare lo studio del meccanismo di una reazione. Metodi non cinetici di studio dei meccanismi. Requisiti termodinamici delle reazioni chimiche. Intermedi reattivi. Applicazione della cinetica chimica allo studio dei meccanismi. Teoria delle reazioni chimiche. Correlazioni lineari di energia libera. Effetto Isotopico. Effetti del mezzo. Acidi e basi e funzioni di acidità. Catalisi omogenea (acida e basica, elettrofila e nucleofila).

Testi Consigliati

Trattandosi di un corso avanzato non ci sono libri di testo, ma il materiale didattico viene fornito in anticipo agli studenti, sotto forma di files.

METODI MATEMATICI PER LA CHIMICA - MAT/05**6 CFU****Prof.ssa E. Prestini**

Spazi di Hilbert.

Spazi vettoriali dotati di prodotto interno: R_n , C_n , L_2 , $L_2 [0,1]$. Disuguaglianza di Cauchy in R_n , C_n , L_2 . Convessità della funzione esponenziale e disuguaglianza di Holder. Disuguaglianza di Cauchy in L_2 .

Introduction to Nanoscience

S.M. Lindsay

Convergenza in norma e convergenza per coordinate in R_n , C_n , L_2 . Convergenza in norma e convergenza puntuale in $L_2 [0,1]$.

Spazi metrici. Completezza. Separabilità. Spazi di Hilbert. Continuità del prodotto interno. Sottospazi di Hilbert. Teorema delle proiezioni. Rappresentazione dei funzionali lineari continui. Sistemi ortonormali. Disuguaglianza di Bessel. Teorema di rappresentazione di Riesz. Formula di Parseval. Trasformazioni lineari tra spazi di Hilbert.

Funzioni di variabile complessa: serie di potenze e funzioni olomorfe.

Serie di funzioni. Convergenza semplice e uniforme. Serie di potenze. Cerchio di convergenza.

Funzioni olomorfe. Esempi: esponenziale, seno e coseno. Proprietà elementari. Integrazione lungo cammini. Teorema dell'indice. Teorema dei residui. Applicazioni al calcolo di integrali di funzioni di variabile reale. Riflessione totale, fibre ottiche.

Serie di potenze nel campo reale. Derivabilità e integrabilità termine a termine. Sviluppabilità in serie di Taylor di funzioni reali di variabile reale.

Serie di Fourier

Serie di Fourier sull'intervallo $[0,1]$. Teorema del Dirichlet. Serie di Fourier

dell'onda quadra. Fenomeno di Gibbs. Onde sonore. Spettro elettromagnetico. Serie di Fourier sull'intervallo $[0,T]$.

Trasformata di Fourier. Formula di inversione. Trasformata di Fourier dell'impulso rettangolare. Principio di indeterminazione. Frange di interferenza. Impulso unitario, delta di Dirac e trasformata di Fourier.

Teorema di campionamento. Trasformata di Fourier discreta (DFT). Trasformata rapida di Fourier (FFT).

Diffrazione all'infinito e il modello matematico di base della cristallografia

Testi consigliati.

Rudin W., Real and Complex Analysis, 1987, McGraw-Hill, New York

Prestini E., Applicazioni dell'analisi armonica, 1996 Hoepli, Milano

Prestini E., The Evolution of Applied Harmonic Analysis. Models of the Real World, 2004, Birkhauser, Boston

NANOSCIENZE – CHIM/02

6 CFU

Docente da definire

Introduzione al corso. La dimensione nanometrica. Nanoscienza e nanotecnologia.

Richiami sulla meccanica quantistica nel mondo nano.

Proprietà strutturali ed elettroniche dei solidi. Livelli di energia di un solido cristallino: struttura a bande. Isolanti, metalli e semiconduttori. Semiconduttori intrinseci ed estrinseci, drogaggio. Giunzione p-n. Diodo a giunzione. Fotodiodo.

Proprietà opto-elettroniche di nano particelle metalliche e semiconduttrici. Applicazioni.

Tecniche sperimentali per lo studio dei sistemi nanometrici.

Microscopia Ottica / Microscopia elettronica SEM/ TEM. Interazione degli elettroni con la materia, Scattering elastico/anelastico, spettroscopia a raggi X e ad elettroni.

Principi della microscopia ad effetto tunnel (STM). L'Effetto Tunnel. Il Microscopio a Scansione Tunnel STM : storia di un premio Nobel. Microscopia a scansione di forza (AFM).

La famiglia delle microscopie a sonda di scansione.

Nuovi materiali del carbonio: I materiali 3D: il Diamante e la Grafite. Fullereni. Nanotubi: Caratteristiche Fisiche, proprietà elettroniche, Metodi di sintesi, alcune applicazioni. Grafene: Storia di un premio Nobel. Proprietà elettroniche e applicazioni. Celle Solari. Principi generali. Celle solari 'convenzionali' (a base di Si o altri semiconduttori). Celle solari di nuova generazione (CNT, grafene, polimeri, Graetzel).

Laser: Interazione radiazione materia. Emissione spontanea e stimolata, coefficienti di Einstein.

Principio di funzionamento di un laser. Laser a stato solido, a gas e liquidi. Applicazioni.

Testi Consigliati

Introduction to Nanoscience S.M. Lindsay Oxford University Press

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, aziridinazione.

Testi Consigliati

Materiale fornito dal docente

SPETTROSCOPIA MOLECOLARE - CHIM/02**8 CFU****Prof. L. Stella**

Spettroscopia di emissione. Spettroscopia risolta nel tempo. Assorbimento transiente: 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, Nanoscopie ottiche, Spettroscopia di singola molecola, Spettroscopia di correlazione della fluorescenza. Elementi di strumentazione: Lasers ed altre sorgenti, Monocromatori, Rivelatori. Esperienze di laboratorio.

Testi Consigliati

Molecular Fluorescence: Principles and Applications, seconda edizione

Bernard Valeur, Mario Nuno Berberan-Santos

ISBN: 978-3-527-32837-6 Wiley, 2012

materiale fornito dal docente

SPETTROSCOPIA NMR DELLE MOLECOLE ORGANICHE - CHIM/06**6 CFU****Prof. D.O. Cicero**

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 ed 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.

NMR di biomolecole. Confronto tra NMR e cristallografia di raggi X. Introduzione alla marcatura isotopica di proteine per NMR. Assegnazione di biomolecole: esperimenti 2D e 3D. Determinazione della struttura molecolare con dati NMR. Studio della dinamica in soluzione tramite esperimenti di rilassamento.

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

Testi Consigliati

Understanding NMR Spectroscopy, James Keeler, Wiley

Spin dynamics, Basics of Nuclear Magnetic Resonance, Malcolm H. Levitt, Wiley

Materiale fornito dal docente