



**TOR VERGATA**  
UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA

## **GUIDA DIDATTICA del CORSO di LAUREA MAGISTRALE in CHIMICA**

### **L'orizzonte culturale**

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.

### **Il corso di studi in breve**

Il corso è erogato in modalità convenzionale e la durata normale del corso è stabilita in 2 anni.

Per conseguire la laurea magistrale lo studente deve aver acquisito 120 crediti. Lo studente acquisisce i crediti previsti per ogni corso di insegnamento (o insieme di essi), o attività formativa, con il superamento di una prova di esame. La frequenza ai corsi è libera (anche se fortemente consigliata), fatti salvi gli adempimenti didattici obbligatori (prove di verifica, esercitazioni di laboratorio). Lo studente iscritto ad un corso deve sostenere l'esame alla fine del corso stesso. Sono previsti almeno 6 appelli per ogni anno accademico, 2 alla fine di ogni semestre didattico con la possibilità di concordare una prova aggiuntiva straordinaria.

Il corso di laurea magistrale in Chimica si propone di fornire conoscenze avanzate nelle discipline chimiche fondamentali (Chimica Analitica, Biochimica, Chimica Fisica, Chimica Inorganica, Chimica Organica). Verranno approfondite in particolare le conoscenze dei meccanismi di reazione in chimica organica, della spettroscopia molecolare, della catalisi, dell'analisi di sistemi complessi. Sono inoltre previsti una serie di insegnamenti specifici per arricchire le conoscenze/competenze dei laureati in campo alimentare, analitico clinico, elettroanalitico, della chimica dei materiali e dei sistemi biologici. Il corso di Laurea Magistrale prevede per la preparazione della prova finale un tirocinio presso un laboratorio di ricerca del Dipartimento di afferenza di almeno 8 mesi (34 CFU). Questa attività può essere svolta anche presso Laboratori di Enti di Ricerca o industriali previa approvazione di un progetto di Tesi e individuazione di un relatore interno.

### **Modalità di accesso**

Per essere ammessi ad un corso di laurea magistrale occorre essere in possesso della laurea o del diploma universitario di durata triennale, ovvero di altro titolo di studio conseguito all'estero, riconosciuto idoneo.

Sono previsti specifici criteri di accesso che prevedono, comunque, il possesso di requisiti curriculari e l'adeguatezza della personale preparazione dello studente.

I laureati in tutti i corsi di laurea della Classe Chimica L-27 Scienze e Tecnologie Chimiche, che abbiano aderito al programma Core Chemistry (Commissione Didattica della Società Chimica Italiana), potranno immatricolarsi senza ulteriori requisiti curriculari.

Per tutti gli altri i requisiti curriculari richiesti sono l'aver conseguito il seguente numero minimo di CFU nei settori scientifico-disciplinari:

SSD	CFU
MAT01-09 e FIS01-08	30
CHIM/01	24
CHIM/02	24
CHIM/03	24
CHIM/06	24

Per tutti gli studenti inoltre è requisito di accesso la conoscenza della lingua inglese di livello C1. Lo studente dovrà produrre idonea certificazione del livello di conoscenza posseduto (ad es. IELTS e TOEFL), ovvero sarà sottoposto ad una verifica tramite colloquio.

In mancanza di tali requisiti il Consiglio di Corso di Studio, dopo aver analizzato la carriera pregressa del candidato, proporrà al Consiglio di Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche le eventuali integrazioni curriculari in termini di crediti formativi universitari che lo studente dovrà acquisire prima della verifica della preparazione individuale.

Per soddisfare il requisito di adeguatezza della personale preparazione lo studente dovrà essere in possesso di conoscenze di base nelle seguenti discipline: chimica inorganica, chimica organica, chimica fisica, chimica analitica, matematica, fisica e informatica; competenze e abilità pratiche nei laboratori chimici; lingua inglese. La verifica del possesso di tali conoscenze avverrà mediante un colloquio.

### **Iscrizione al corso di laurea in Chimica Magistrale**

Tutte le informazioni sono riportate al link <http://www.scienze.uniroma2.it/?cat=385&catParent=16>

Inizio delle lezioni:  
I semestre    inizio 03 Ottobre 2022 fine 13 Gennaio 2023  
II semestre    inizio 06 marzo 2023 fine 09 Giugno 2023

Le informazioni sul Corso di Laurea sono al link <http://www.scienze.uniroma2.it/?cat=14&catParent=4>

### **Trasferimenti**

Il trasferimento da altri atenei può essere accolto in base alle possibilità logistiche e allo studente potranno essere riconosciuti i crediti conseguiti nella sua carriera.

Gli studenti dovranno presentare domanda preliminare entro i termini indicati sul bando di ammissione.

Il Consiglio di Corso di Studio propone pareri al Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche sul riconoscimento di crediti relativi ad attività formative pregresse, valutandone la congruità con gli obiettivi didattici e formativi del corso di laurea, assicurando il riconoscimento del maggior numero possibile dei crediti già maturati dallo studente. Il Consiglio di Corso di Studio potrà valutare la necessità di colloqui e/o

prove integrative per la verifica delle conoscenze effettivamente possedute dallo studente.

Sarà inoltre possibile il riconoscimento di un massimo di 12 CFU relative a conoscenze e abilità professionali certificate, nonché altre conoscenze e abilità maturate in attività formative di livello post-secondario alla cui progettazione e realizzazione l'università abbia concorso.

### **Obiettivi formativi**

Gli obiettivi formativi specifici del corso di laurea magistrale in Chimica sono strettamente correlati alle discipline fondamentali, che forniscono una preparazione di base sia per l'inserimento nel mondo del lavoro che per la prosecuzione degli studi per il conseguimento della Laurea Magistrale e del Dottorato di Ricerca o attraverso corsi di Master.

La laurea magistrale in Chimica viene conferita agli studenti che abbiano conseguito i risultati di apprendimento descritti nel seguito secondo i "descrittori di Dublino".

Questi risultati vengono conseguiti attraverso la frequenza a corsi e laboratori. I corsi sono suddivisi di norma in una parte teorica ed una parte costituita da esercitazioni volte alla soluzione di problemi; la verifica dell'apprendimento si basa su prove scritte (che possono essere svolte in itinere e alla fine del corso) ed esami orali.

I corsi di laboratorio prevedono una parte introduttiva ex-cathedra ed una parte svolta in laboratorio dagli studenti, suddivisi in piccoli gruppi, sotto la guida dei docenti; la verifica dell'apprendimento si basa su relazioni di laboratorio, di gruppo e/o individuali, elaborate di norma durante il corso ed esami orali. I corsi di laboratorio comprendono anche attività di tirocinio formativo, alle quali possono aggiungersi altre attività specifiche di orientamento al mondo del lavoro. La quota dell'impegno orario complessivo a disposizione dello studente per lo studio personale o per altra attività formativa di tipo individuale è pari ad almeno il 60% dello stesso.

### **Risultati di apprendimento attesi, espressi tramite i descrittori di Dublino del titolo di studio**

#### Capacità di applicare conoscenza e comprensione (applying knowledge and understanding)

Il laureato magistrale:

- è in grado di recuperare tutte le informazioni bibliografiche necessarie a pianificare ed effettuare la sintesi di molecole organiche, inorganiche e organometalliche;
- possiede abilità avanzate nell'elaborazione del dato scientifico;
- è capace di impostare e condurre una sperimentazione in campo sintetico e analitico;
- è in grado di comprendere una problematica legata alla sua professione, di eseguire una valutazione critica e di proporre soluzioni specifiche;
- è in grado di utilizzare la strumentazione scientifica, di elaborare i dati sperimentali, di pianificare ed eseguire l'analisi e la caratterizzazione di campioni reali;
- è in grado di avvalersi di metodi informatici per l'elaborazione dei dati.

Le sopraelencate capacità vengono acquisite mediante le attività formative attivate in particolare nell'ambito dei settori disciplinari caratterizzanti. Fondamentale per l'acquisizione e la verifica sul campo di tali capacità sarà l'attività di tesi sperimentale da condurre all'interno di un gruppo di ricerca del nostro ateneo e sotto la guida di un docente responsabile, che ne curi il disegno del progetto di tesi, le modalità di attuazione,

l'inserimento all'interno di un gruppo di ricerca. L'obiettivo formativo è quello di favorire nello studente l'attitudine propositiva, la capacità di elaborazione autonoma e di comunicazione dei risultati del lavoro svolto, la capacità di pianificare e condurre a termine una sperimentazione.

#### Autonomia di giudizio (making judgements)

Il laureato magistrale:

- è capace di raccogliere dati sperimentali e di interpretarli;
- è capace di programmare attività sperimentale valutandone tempi e modalità;
- possiede capacità organizzativa sul lavoro e capacità di lavorare in gruppo;
- possiede capacità autonoma di giudizio nel valutare e quantificare il risultato;
- è capace di valutare criticamente i parametri di qualità di tecniche alternative in funzione della natura del problema sperimentale;
- è capace di valutare le possibilità e i limiti di tecniche analitiche e di caratterizzazione più avanzate affrontando e risolvendo problemi complessi ad esse legati;
- è capace di adattarsi ad ambiti di lavoro e tematiche diverse;
- è capace di reperire e vagliare fonti di informazione, banche dati, letteratura ecc.

Le attività di esercitazione e di laboratorio offrono occasioni per sviluppare capacità decisionali e di giudizio, mentre lo strumento didattico privilegiato è il significativo lavoro di tesi su un argomento di ricerca originale.

#### Abilità comunicative (communication skills)

Il laureato magistrale:

- è capace di comunicare in forma scritta e verbale, in italiano ed in inglese, con utilizzo di sistemi multimediali;
- è in grado di sostenere un contraddittorio sulla base di un giudizio sviluppato autonomamente su una problematica inerente ai suoi studi;
- è capace di interagire con altre persone e di lavorare in gruppo;
- è capace di lavorare in ampia autonomia e di adattarsi a nuove situazioni;
- possiede capacità di pianificazione e di gestione del tempo;
- è capace di svolgere attività di formazione e di addestramento sperimentale a studenti della laurea triennale.

L'acquisizione delle abilità sopraelencate viene valutata a diversi livelli all'interno delle attività formative, in primo luogo durante le verifiche che sono principalmente costituite da esami orali, prove scritte e relazioni di laboratorio, come anche nelle attività di partecipazione a gruppi di lavoro costituiti all'interno di corsi teorici e sperimentali. Tali capacità vengono ulteriormente perfezionate nella preparazione dell'elaborato di tesi e della dissertazione finale anche attraverso l'uso di sistemi multimediali.

#### Capacità di apprendimento (learning skills)

Il laureato magistrale:

- è in grado di recuperare agevolmente le informazioni dalla letteratura, banche dati ed internet;
- possiede capacità personali nel ragionamento logico e nell'approccio critico ai problemi nuovi;
- è capace di apprendere in modo autonomo, doti importanti per intraprendere studi futuri, per affrontare nuove tematiche scientifiche o problematiche professionali, più in generale per la comprensione di

problematiche concrete in vari contesti lavorativi;

- è in grado di continuare a studiare autonomamente soluzioni a problemi complessi anche interdisciplinari, reperendo le informazioni utili per formulare risposte e sapendo argomentare le proprie proposte in contesti specialistici e non.

Al raggiungimento delle sopraelencate capacità concorrono, nell'arco dei due anni di formazione, tutte le attività individuali che attribuiscono un forte rilievo allo studio personale: ore di studio individuali, lavoro di gruppo, elaborati e relazioni scritte, e in particolare il lavoro svolto durante il periodo di tesi.

## **Struttura della didattica**

### Frequenza

Gli insegnamenti hanno una durata semestrale. La frequenza ai corsi è in genere non obbligatoria, sebbene sia fortemente consigliata, mentre è obbligatoria la frequenza alle esercitazioni di laboratorio. Informazioni dettagliate al riguardo sono riportate nella Scheda dell'Insegnamento per ogni singolo corso.

### Orientamento e Tutorato

L'orientamento in ingresso dei laureati triennali è curato dal coordinatore del corso di studi e dai docenti tutor. Il tutorato in itinere viene espletato dai docenti tutor indicati che assistono gli studenti nella preparazione dei piani di studio e nella scelta del laboratorio per il lavoro finale della tesi di laurea.

### Tirocini/Stage

Il tirocinio obbligatorio per la prova finale, può essere svolto presso un laboratorio dell'Università, oppure, previa autorizzazione del Consiglio di Corso di Studio e sotto il controllo di un relatore scientifico interno, presso un laboratorio di altro ente (pubblico o privato) riconosciuto. Gli studenti debbono inviare una comunicazione scritta di inizio attività di tirocinio (lavoro di tesi) alla Segreteria Didattica del corso di studio. L'impegno temporale dedicato alla prova finale e in particolare il periodo di tirocinio, non può eccedere i limiti fissati dai 34 CFU previsti nell'ordinamento didattico.

Le attività possono essere svolte sia nei laboratori dell'Università, sia presso altri centri di ricerca pubblici o privati.

L'Ateneo ha attivato un servizio di assistenza per i tirocini esterni.

<http://www.scienze.uniroma2.it/?cat=19&catParent=16>

La segreteria della Macroarea di Scienze cura l'organizzazione dei tirocini formativi presso enti di ricerca esterni o aziende.

## **Piano di Studi**

E' previsto un solo curriculum di studi. Gli studenti sono tenuti a presentare un piano di studi, presso la segreteria didattica (scadenza 30/11 di ogni accademico), in cui specificheranno le attività a scelta.

Il piano di studio individuale può essere in seguito modificato presentandone richiesta mediante il modulo "Richiesta modifica del piano di studi" unitamente al piano di studi con le variazioni riportate; **il termine ultimo per richiedere la modifica al piano di studio individuale è fissato alla sessione precedente la data in cui lo studente intende laurearsi.**

Il piano di studi è valido e può essere approvato solo ove l'insieme delle attività in esso contemplate corrisponda ai vincoli stabiliti dall'ordinamento didattico del corso di studio e dall'offerta didattica programmata annuale relativa alla coorte di riferimento dello studente e comporti l'acquisizione di un numero di crediti non inferiore a quello richiesto per il conseguimento del titolo.

I crediti acquisiti per insegnamenti aggiuntivi rispetto a quelli necessari per concludere il percorso di studio rimangono registrati nella carriera dello studente e possono essere successivamente riconosciuti ai sensi della normativa in vigore. Le valutazioni ottenute negli insegnamenti aggiuntivi non rientrano nel computo della media dei voti degli esami di profitto, ma sono inserite nel diploma supplement.

Il Consiglio di Dipartimento approva i piani di studio su proposta del Consiglio di Corso di Studi, che valuta la loro 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).

### **Esame di Laurea**

Lo studente dovrà dare comunicazione dell'inizio del lavoro relativo alla tesi di Laurea compilando il modulo disponibile sul sito della Macroarea di Scienze.

Lo studente dovrà presentare la domanda di laurea compilando il modulo disponibile sul sito Delphi <https://delphi.uniroma2.it/totem/jsp/index.jsp>, almeno **20 giorni** prima della sessione di laurea. Una copia del modulo dovrà essere consegnata presso la Segreteria Didattica del CdS (Macroarea di Scienze) con il nome del docente relatore ed il titolo della tesi.

Per sostenere l'esame di laurea lo studente deve avere superato tutti gli esami di profitto relativi agli insegnamenti inclusi nel proprio piano di studi, le eventuali prove di idoneità ed essere in regola con il versamento delle tasse e dei contributi richiesti.

Per conseguire la laurea lo studente deve aver acquisito 120 CFU, comprensivi di quelli relativi alla conoscenza obbligatoria, oltre che della lingua italiana, di una lingua dell'Unione europea, fatte salve le norme speciali per la tutela delle minoranze linguistiche.

La Commissione preposta all'esame conclusivo è costituita da 7 componenti, docenti dell'Ateneo e viene nominata dal Direttore del Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche, su proposta del Coordinatore del corso di studio.

La determinazione della votazione viene effettuata a partire dal voto di partenza, definito dalla media pesata dei voti degli esami; tale voto (in centodecimi) viene incrementato di 0.2 punti per ciascuna lode conseguita al superamento degli esami; in seguito alla discussione della tesi di laurea, il voto può essere aumentato di un massimo di 7 punti, così ripartiti:

- massimo 2 punti vengono assegnati dal relatore, in base alla sua valutazione del lavoro svolto durante la tesi;
- massimo 2 punti vengono assegnati dal controrelatore, in base alla lettura della tesi;
- massimo 3 punti vengono assegnati (a maggioranza) dalla commissione, in base alla valutazione della presentazione e discussione della tesi;

0,5 punti aggiuntivi vengono assegnati qualora lo studente si laurei in corso. Per poter aspirare al 110 e lode il

voto di partenza (dopo la correzione per le lodi conseguite negli esami) deve essere uguale o superiore al 104 (senza approssimazioni). Se questa condizione è soddisfatta, la Commissione può concedere la lode qualora lo studente raggiunga almeno un voto pari a 111 dopo l'assegnazione dei punti aggiuntivi.

La relazione e la relativa discussione della prova finale possono essere svolte in lingua inglese, previa domanda del candidato ed approvazione del Consiglio di Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche.

Le prove finali per il conseguimento della laurea relative a ciascun anno accademico devono svolgersi entro il mese di maggio dell'anno accademico successivo; entro tale data possono essere sostenute dagli studenti iscritti all'anno accademico precedente senza necessità di reinscrizione.

Le prove finali si svolgono nell'arco di almeno tre sessioni distribuite, ove possibile, nei seguenti periodi: da giugno a luglio; da settembre a dicembre; da febbraio a maggio. I periodi in cui si svolgono le prove finali vengono pubblicizzati sul sito web del corso di laurea all'inizio di ogni anno accademico.

## OFFERTA FORMATIVA

### INSEGNAMENTI OBBLIGATORI:

#### 1° ANNO

##### I semestre

[B]	CHIM/03	Chimica Inorganica Avanzata	6 cfu
[B]	CHIM/01	Chimica Analitica Applicata	6 cfu
[B]	CHIM/06	Chimica Organica IV	6 cfu

##### II semestre

[B]	BIO/10	Biochimica e Laboratorio	9 cfu
[B]	CHIM/02	Spettroscopia Molecolare	9 cfu

#### 2° ANNO

##### I semestre

[B]	CHIM/07	Materiali Molecolari	6 cfu
-----	---------	----------------------	-------

##### 1 insegnamento a scelta

- [C] MAT/05 Metodi Matematici per la Chimica [I anno – II semestre - 6 cfu]  
 [C] CHIM /08 Chimica Farmaceutica e Tossicologia [II anno – I semestre - 6 cfu]

##### II semestre

[F]	---	Abilità Informatiche e telematiche	2 cfu
[E]	---	Prova Finale	34 cfu

### INSEGNAMENTI COMPLEMENTARI (TOTALE 24 CFU):

#### 4 insegnamenti rispettando le restrizioni previste:

- Un insegnamento tra i seguenti:

[B] Chimica Elettroanalitica [I anno – II semestre, CHIM /01 - 6 cfu]

[B] Chimica Analitica Clinica [II anno – I semestre, CHIM /01 - 6 cfu]

• **Un insegnamento tra i seguenti:**

- [B] Catalisi [I anno - I semestre, CHIM /03 - 6 cfu]
- [B] Chimica dei Materiali [I anno - II semestre, CHIM/03 - 6 cfu]
- [B] Chimica dello Stato Solido [II anno - I semestre, CHIM/03 - 6 cfu]
- [B] Materiali Nanostrutturati [II anno - I semestre, CHIM/03 - 6 cfu]

• **Un insegnamento tra i seguenti:**

- [B] Chimica Teorica [I anno - I semestre, CHIM/02 - 6 cfu]
- [B] Chimica Fisica Biologica [I anno - II semestre, CHIM/02 - 6 cfu]
- [B] Chimica Macromolecolare [I anno - II semestre, CHIM/02 - 6 cfu]
- [B] Nanoscienze [II anno - I semestre, CHIM/02 - 6 cfu]
- [B] Chimica computazionale di sistemi biologici [I anno - II semestre, CHIM/02 - 6 cfu]
- [B] Biopolimeri per applicazioni industriali [I anno - II semestre, CHIM/02 - 6 cfu]

• **Un insegnamento tra i seguenti:**

- [B] Chimica Sostenibile [I anno - I semestre, CHIM /06 - 6 cfu]
- [B] Chimica Organica V [I anno - II semestre, CHIM/06 - 6 cfu]
- [B] Spettroscopia NMR delle Molecole Organiche [I anno - II semestre, CHIM/06 - 6 cfu]
- [B] Sintesi Asimmetrica [II anno - I semestre, CHIM/06 - 6 cfu]
- [B] Chimica degli Alimenti [II anno - II semestre, CHIM /10 - 6 cfu]

**INSEGNAMENTI A SCELTA DELLO STUDENTE (TOTALE 12 cfu):**

Si possono indicare due insegnamenti tra i seguenti e i precedenti non scelti, oppure si possono indicare altri insegnamenti tra i corsi offerti dall'Ateneo:

- Biomateriali [I anno - II semestre, CHIM /02 - 6 cfu]
- Bioinformatica Strutturale [II anno - I semestre, BIO/10 - 6 cfu]
- Didattica della Chimica [II anno - I semestre, CHIM /02 - 6 cfu]
- Enzimologia [II anno - I semestre, BIO/10 - 6 cfu]
- Chemometria ed Applicazioni [II anno - II semestre, CHIM/07 - 6 cfu]
- Chimica Combinatoriale e Drug Design [II anno - II semestre, BIO/10 - 6 cfu]
- Sistemi non-covalenti. Design ed applicazioni [II anno - II semestre, CHIM/07 - 6 cfu]

Legenda:

- [A] Attività formative di Base
- [B] Attività formative Caratterizzanti
- [C] Attività formative Affini e Integrativi
- [E] Prova finale e lingua inglese
- [F] Ulteriori attività formative

Si fa notare inoltre che i due corsi a scelta libera, saranno verbalizzati e conterranno nella media come un unico esame (con voto pari alla media dei singoli voti, pesati con i relativi crediti).



I corsi a scelta saranno considerati nel calcolo della media solo se riconosciuti di carattere scientifico dal Consiglio di Dipartimento.

## PROGRAMMI DEGLI INSEGNAMENTI

### **BIOINFORMATICA STRUTTURALE - 6 CFU**

**Dott. Marco Sette**

Introduzione all' ambiente Linux.

Analisi di sequenze primarie di proteine e DNA. Metodi di predizione della struttura secondaria e terziaria di proteine. Studio delle caratteristiche strutturali di proteine e DNA mediante analisi al computer. Elettrostatica di proteine e DNA. Docking.

Testi adottati: Dispense del docente

Pascarella, Paiardini. BIOINFORMATICA. Dalla sequenza alla struttura delle proteine. Zanichelli.

### **BIOCHIMICA E LABORATORIO - 9 CFU**

**Prof.ssa Sonia Melino**

Durante il corso saranno affrontati i seguenti argomenti: Caratteristiche generali delle Macromolecole Biologiche (proteine, DNA, RNA, miRNA); Replicazione e trascrizione del DNA; Sintesi e Degradazione delle proteine; Struttura delle Proteine e Relazione Struttura/Funzione delle Proteine; Biosegnalazione: meccanismi molecolari alla base della trasduzione del segnale ormonale, dei sistemi sensoriali (trasduzione del segnale visivo) e della contrazione muscolare.

Cenni sui meccanismi molecolari alla base della morte cellulare.

Programmata e sull'identificazione di target terapeutici per le terapie antitumorali; Matrice extracellulare, Ingegneria Tissutale, riparo e rigenerazione dei tessuti.

Per la parte di Laboratorio saranno effettuate lezioni teoriche ed esercitazioni pratiche in laboratorio riguardo i seguenti argomenti: estrazione di DNA plasmidico da ceppi E.coli antibiotico resistenti precedentemente trasformati al fine di ottenere l'amplificazione del gene di una proteina; determinazione della concentrazione del DNA ed analisi del DNA estratto mediante elettroforesi in gel di agarosio; Tecniche di sequenziamento del DNA e Tecniche di base per lo studio delle interazioni DNA-proteina. Tecniche per la purificazione ed analisi delle proteine ricombinanti: cromatografia d'affinità ed elettroforesi in gel di poliacrilammide di proteine al fine di valutare l'espressione proteica dopo l'induzione, il grado di purezza del campione proteico dopo cromatografia di affinità e la determinazione del peso molecolare (SDS-PAGE).Western-blotting per l'analisi dell'espressione genica; Microarray di DNA e di proteine; bioinformatica ed utilizzo delle banche dati di macromolecole biologiche per informazioni funzionali e strutturali, utilizzo di algoritmi predittivi e per le comparazioni della struttura primaria e terziaria delle proteine e l'identificazione di domini/motivi strutturali e funzionali delle proteine. Uso di banche bibliografiche, visita di una start-up universitaria come modello di ricerca traslazionale.

Testi adottati: Principi di Biochimica Lenninger Biochimica – Zanichelli o Garret e Grisham - Biochimica – Zanichelli o Stryer - Biochimica – Zanichelli

Per la struttura delle proteine : INTRODUZIONE ALLA STRUTURA DELLE PROTEINE Branden e Tooze Zanichelli

## **BIOMATERIALI - 6 CFU**

**Prof. Gaio Paradossi**

*(insegnamento fruito dal corso di laurea in Scienza e Tecnologia dei Materiali)*

Biomateriali soffici: definizioni, polimeri funzionalizzati, colloidi.

Microstrutture e mesostrutture. Caratterizzazione di equilibrio e dinamica dei componenti in fase gel: metodi reologici, spettroscopici, calorimetrici e di scattering. Teoria della gelazione. Applicazioni: esempi selezionati dalla letteratura riguardanti sostituti tissutali, agenti di contrasto per ultrasuoni, veicolatori per rilascio controllato di farmaci.

Sessioni di laboratorio con operazioni comuni con biomateriali

Testi adottati: Ian W. Hamley, Introduction to Soft Matter, Wiley. Materiale didattico fornito dal docente a supporto dei concetti sviluppati durante il corso.

## **CATALISI - 6 CFU**

**Prof. Pietro Tagliatesta**

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.

Testi adottati: dispense fornite dal docente

## **CHIMICA ANALITICA APPLICATA - 6 CFU**

**Dott. Alessandro Porchetta**

Equilibri chimici multipli in soluzione acquosa, equilibri acido - base, equilibri di precipitazione, di complessazione e equilibri redox. Metodi analitici relativi ed assoluti: calibrazione mediante standard esterno, calibrazione mediante aggiunte standard, uso degli standard interni.

Introduzione alla potenziometria: analisi potenziometrica diretta, elettrodi ionoselettivi, elettrodo a vetro, errori ed uso dell'elettrodo a vetro, elettrodi a vetro combinati e per altri cationi, titolazioni potenziometriche.

Metodi di analisi spettrofotometrica: radiazione elettromagnetica, spettri di assorbimento in fase gassosa e

condensata (spettri elettronici, rotazionali e vibrazionali), assorbanza e trasmittanza, legge di Lambert-Beer, deviazioni dalla legge di Lambert-Beer, analisi di miscele, errore spettrofotometrico, strumentazione per spettrofotometria (sorgenti, filtri e monocromatori, celle per il campione, rivelatori, configurazioni strumentali). Introduzione ai metodi di separazione, separazione per estrazione e per scambio ionico.

Testi adottati: "Fondamenti di Chimica Analitica Quantitativa", Daniel C. Harris (Zanichelli Editore, Bologna, 2017); "Fondamenti di Chimica Analitica di Skoog e West", F. J. Holler, S. R. Crouch (Edizione: III, EdiSES, S.r.l., Napoli, 2015).

## **CHIMICA ANALITICA CLINICA - 6 CFU**

**Prof.ssa Fabiana Arduini**

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, CO<sub>2</sub>) nelle analisi cliniche. Amperometria (Sensori ad O<sub>2</sub> e CO<sub>2</sub>)

- 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 adottati: I. Spandrio: Manuale di laboratorio, vol. 1, Ed. PICCIN; N.W. Tiez: Principi di chimica clinica, ed. PICCIN

## **CHIMICA COMPUTAZIONALE DIN SISTEMI BIOLOGICI 6 CFU**

**Prof. Gianfranco Bocchimfuso**

Campi di forza classici. Esplorazione dello spazio delle fasi. Simulazioni di dinamica molecolare micronanoniche e canoniche. Campionamento aumentato dello spazio delle fasi (simulazioni REMD e metadinamica). Valutazione della energia di legame mediante tecniche MM/PBSA e simili. Valutazioni dello spazio delle fasi mediante tecniche di "campionamento ad ombrello" e valutazione del potenziale di forza medio. Dinamiche molecolari di non equilibrio. Esercitazioni pratiche

Testi adottati: materiale fornito dal docente

## **BIOPOLIMERI PER APPLICAZIONI INDUSTRIALI 6 CFU**

**Prof.ssa Emanuela Gatto**

Polimeri sintetici, polimeri semi-sintetici e polimeri naturali.

Polimeri naturali: polisaccaridi, proteine, poliesteri, polinucleotidi, poliisoprene.

Tecniche di caratterizzazione termica e spettroscopica di polimeri naturali.

Tecniche di caratterizzazione meccanica di polimeri naturali.

Definizione di biodegradabilità e compostabilità.

Applicazione dei polimeri naturali nell'elettronica molecolare.

Applicazione dei polimeri naturali nelle celle solari. Fotosintesi naturale. Spettroelettrochimica. Celle solari.

Applicazioni dei polimeri naturali nel drug delivery.

Applicazioni dei polimeri naturali nelle bioplastiche.

Laboratorio: ideazione, progettazione e sintesi di nuovi materiali a base di polimeri naturali. Il laboratorio sarà guidato dal docente ma gestito in maniera autonoma dagli studenti, al fine di concorrere all'autonomia dello studente.

Visita di alcuni spin-off di Ateneo, per la comprensione degli sviluppi applicativo-commerciali della ricerca di base.

Testi adottati: materiale bibliografico per la preparazione dell'esame è costituito dalle dispense delle lezioni fornite dal docente.

Testi base di riferimento: S. Bruckner, Scienza e Tecnologia dei Materiali Polimerici, 2016, ed. Edises

**CHIMICA DEGLI ALIMENTI - 6 CFU**

**Prof.ssa Sara Nardis**

Glucidi. Generalità, classificazione; monosaccaridi, oligosaccaridi, polisaccaridi, glicoproteine, derivati, reazioni caratteristiche e di riconoscimento dei glucidi; proprietà nutrizionali. Protidi Generalità, funzioni, amminoacidi; peptidi, proteine, struttura e classificazione delle proteine; reazioni caratteristiche e di riconoscimento di amminoacidi e protidi; proprietà funzionali e nutrizionali delle proteine. Farine. Lipidi. Generalità, classificazione, acidi grassi, acidi grassi essenziali, acilgliceroli, fosfolipidi, glicolipidi, cere, steroidi, terpeni. Reazioni caratteristiche e di riconoscimento dei lipidi. Proprietà nutrizionali. Acqua. Proprietà e caratteristiche chimico-fisiche; l'acqua negli alimenti; acqua potabile, disinfezione delle acque, analisi di un'acqua potabile. Acque minerali. Sali Minerali. Vitamine. Generalità e classificazione. Contaminazione chimica degli alimenti. Generalità, contaminazione da pesticidi, contaminazione da contenitori, contaminazione da metalli pesanti.

Additivi Alimentari. Generalità, conservanti. Additivi Alimentari. Generalità, conservanti, antiossidanti, acidificanti coloranti, edulcoranti. Conservazione degli Alimenti.

Conservazione con il calore, con il freddo, per disidratazione. Liofilizzazione. Latte e derivati; vino; olio di oliva Pane e cereali.

Testi adottati: Patrizia Cappelli, Vanna Vannucchi - PRINCIPI DI CHIMICA DEGLI ALIMENTI

Conservazione Trasformazioni Normativa

Zanichelli Editore

**CHIMICA DEI MATERIALI - 6 CFU**

**Prof. Riccardo Polini**

Solidi cristallini e amorfi. Reticoli e strutture cristalline.

Reticoli di Bravais. Indici di Miller: posizioni cristallografiche, direzioni cristallografiche  $[uvw]$ , piani cristallografici  $(hkl)$ . Strutture dei metalli: reticoli bcc, fcc, hcp. Siti interstiziali ottaedrici e tetraedrici nei solidi metallici. Fattore di compattazione atomica. Densità teorica (cristallografica). Solidi ionici. Raggi ionici e stabilità delle strutture cristalline (raggio critico).

Strutture di CsCl, NaCl, ZnS (SiC), fluorite (zirconia cubica). Zirconia stabilizzata come conduttore di ioni ossigeno, sensori di ossigeno, sonda lambda. Spinelli, energia di stabilizzazione del campo cristallino (CFSE). Perovskiti, fattore di tolleranza, t. Conduttori ionici a base di gallato di lantanio drogato. Solidi covalenti, Cristalli molecolari. Cenni di diffrazione dei raggi-X. Legge di Bragg. Intensità dei segnali di diffrazione: fattore di scattering atomico e fattore di struttura.

Difetti dei reticoli cristallini. Difetti di punto. Atomi/ioni sostituzionali e interstiziali. Vacanze. Notazione di Kroeger-Vink. Calcolo dell'entropia configurazionale e concentrazione delle vacanze all'equilibrio. Difetti di Frenkel e Schottky nei solidi ionici.

L'equazione di Arrhenius della conducibilità ionica in un campo elettrico. Conducibilità ionica in funzione della T: conducibilità intrinseca ed estrinseca.

Difetti di linea. Dislocazioni a spigolo e a vite. Circuito e vettore di Burgers. Campo di sforzo intorno ad una dislocazione a spigolo e a vite. Sistemi di scorrimento. Movimento delle dislocazioni. Fattore di Schmid. Meccanismi di rafforzamento dei materiali metallici: soluzione solida, precipitazione, incrudimento, riduzione del grano (Legge di Hall-Petch).

Difetti di superficie. Bordi grano ad alto e basso angolo. Stacking faults. Twins.

Difetti di volume.

Curva sforzo-deformazione di materiali metallici. Legge di Hooke. Modulo di Poisson. Determinazione di sforzo e deformazione veri dai valori nominali.

Frattura fragile e duttile. Frattura intergranulare e transgranulare. Difetti come concentratori degli sforzi. Teoria di Griffith (fattore di intensità degli sforzi e tenacità a rottura). Comportamento statistico a rottura dei ceramici (Weibull).

Comportamento a fatica. Limite di fatica. Legge di Paris. Scorrimento viscoso dei materiali metallici.

Creep primario, secondario e terziario.

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

Introduzione ai materiali polimerici.

Struttura e proprietà dei polimeri. Temperatura di transizione vetrosa. Polimeri amorfi e semicristallini. Comportamento elastico, viscoso e viscoelastico.

Materiali compositi. Compositi rinforzati con particelle. Esempi: cermet, compositi a matrice metallica (MMC), polimeri rinforzati. Regola delle miscele: limite inferiore e superiore del modulo elastico. Compositi rinforzati con fibre: comportamento sforzo-deformazione, carico di rottura longitudinale e trasversale.

Processi di sinterizzazione di polveri. Equazione di Young-Laplace. Parametri per lo studio della evoluzione del processo di sinterizzazione. Dilatometria. Evoluzione dell'area superficiale. Equazione di BET. I vari stadi della sinterizzazione. Meccanismi di trasporto di massa nella sinterizzazione: flusso viscoso; evaporazione-condensazione; diffusione superficiale; diffusione al bordo grano; diffusione nel volume; flusso plastico.

Cinetiche di sinterizzazione. Parametri di processo e microstruttura nella sinterizzazione allo stato solido. Sinterizzabilità di particelle "miste". Sinterizzazione attivata: criteri per un funzionamento ed esempi.

Sinterizzazione con fase liquida: principi generali e diagramma di German. Sinterizzazione sotto pressione. Pressatura isostatica a caldo (HIP). Case study: i carburi cementati. La scoperta del carburo di tungsteno da parte di Henry Moissan e gli studi del Dr Schroeter (OSRAM). La sintesi diretta del carburo di tungsteno per riduzione carbotermica di minerali di tungsteno.

Microscopia elettronica a scansione: descrizione dello strumento; le sorgenti di elettroni.

Interazione elettrone-materia: emissione di elettroni secondari (SE), emissione di elettroni retrodiffusi (BSE), emissione di elettroni Auger, emissione di raggi-X caratteristici, emissione continua di raggi-X (radiazione di frenamento). Principi di microanalisi EDS al SEM: risoluzione spaziale dell'EDS; limite di rilevabilità degli elementi; mappe di raggi-X, analisi di linea (linescan).

Testi adottati: Materiale didattico fornito dal docente, sia sotto forma di fotocopie dei lucidi proiettati a lezione, sia come file pdf scaricabili da Didattica Web 2

<http://didattica.uniroma2.it/docenti/curriculum/4845-Riccardo-Polini>).

### CHIMICA DELLO STATO SOLIDO - 6 CFU

**Prof. Massimo Tomellini**

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

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. 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 adottati: 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 "

### MATERIALI MOLECOLARI - 6 CFU

**Prof. Roberto Paolesse**

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.

Testi adottati: materiale didattico fornito dal docente.

### CHIMICA ELETTROANALITICA - 6 CFU

**Prof. Francesco Ricci**

Introduzione alla Chimica Elettroanalitica

Concetti base di elettrochimica, elettrodi, tecniche elettroanalitiche conduttimetriche. Conduttori di I e II specie. Elettrodi di riferimento.

Tecniche Elettroanalitiche Voltammetriche e Amperometriche.

Cronoamperometria ed equazione di Cottrell. Sensori amperometrici. Fondamenti delle tecniche voltammetriche. Strumentazione. Modelli dell'interfaccia elettrochimica: modello di Helmholtz. La velocità del trasferimento elettronico (TE) eterogeneo. Processi elettrochimici reversibili ed irreversibili. Processi anodici e catodici. Equazione di Butler-Volmer: costante eterogenea standard. Sovratensione. Modello di Marcus del TE omogeneo ed eterogeneo. Il trasporto di massa in soluzione. Legge di Fick e soluzione dell'equazione della diffusione in alcuni casi di interesse elettroanalitico. Metodi per il controllo del trasporto di massa.

Polarografia: polarogrammi, elettrodo a goccia mercurio e onda polarografica, equazione di Ilkovic e equazione di Heyrowski-Ilkovic. Vantaggi e svantaggi dei metodi polarografici. Determinazione delle costanti e del numero di complessazione. Voltammetria lineare e ciclica. Analisi qualitativa: sistemi elettrochimicamente reversibili ed irreversibili. Analisi quantitativa: equazione di Randles-Sevcik. Tecniche voltammetriche ad impulso (NPV e NPP, DPV e DPP, SWV). Tecniche di stripping (ASV, CSV, PSA, AdSV). Tecniche di flusso (Rotating disk electrode, Rotating ring disk electrode, celle a flusso).

Applicazioni ed esempi pratici

Biosensori enzimatici, sensori a DNA, mediatori elettrochimici, mediatori diffusionali. Strumenti portatili ed esempi commerciali di sensori elettrochimici. Polimeri conduttori. Elettrodi stampati produzione ed utilizzo. Self Assembled Monolayer. Materiali elettrodi. Grafite, carbon paste, glassy carbon. Sensori monouso per controllo della glicemia. Sensori ad inibizione enzimatica.

Esperienze di laboratorio

Utilizzo di elettrodi stampati, Voltammetria Ciclica, Voltammetria di Stripping Anodico, mediatori elettrochimici per H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, sensori a DNA.

Testi adottati: materiale didattico fornito dal docente

## **CHIMICA FARMACEUTICA e TOSSICOLOGIA - 6 CFU**

**Prof. Daniel Oscar Cicero 3 cfu – Prof.ssa Beatrice Macchi 3 cfu**

**\*(insegnamento erogato in lingua inglese)**

Il corso tratterà sulle diverse attività che si svolgono in un centro di ricerca dell'industria farmaceutica. In particolari, i moduli saranno:

- Identificazione di target terapeutici a partire da hit compounds
- Chimica medicinali e la scoperta di lead compounds
- Peptidi terapeutici: sviluppo ed esempi di nuovi farmaci
- Metabolismo di farmaci e farmacocinetica
- Tossicologia di farmaci e composti chimici

Saranno invitati, per ognuno di questi moduli, specialisti appartenenti a IRBM Science Park. Si organizzerà inoltre una giornata di visita all'IRBM per conoscere i laboratori e avere un'illustrazione pratica delle diverse attività che si svolgono.

- 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.

- Introduzione alla Tossicologia: termini e definizioni tossicologiche. Classificazione delle tossicità dei farmaci, meccanismo di azione, mutagenesi, carcinogenesi. Descrizione saggi per la valutazione della tossicità in vitro e in vivo. Tossicologia ambientale: inquinanti atmosferici, solventi, pesticidi, inquinanti ambientali, metalli.

Testi adottati: il corso si basa su materiale provvisto dal docente.

## CHIMICA FISICA BIOLOGICA - 6 CFU

**Dott.ssa Ester Chiessi**

- Proprietà strutturali di biopolimeri: Stabilità locale. Transizioni tra diverse conformazioni. Mappe energetiche per a.a. naturali e di sintesi. Caratteristiche delle principali conformazioni elicoidali. Esempi di doppia elica. Esempi di tripla elica. G-quadruplex. Caratteristiche elicoidali. Supercoil. Proprietà metriche/topologiche di macromolecole biologiche.

- Richiami di spettroscopia: Forza del dipolo. Forma di banda. Forza dell'oscillatore. Derivata di una banda.

- Dicroismo circolare (CD): principi generali.

- Transizioni helix-coil in omo-polipeptidi: Modello di Schellman. Modelli di Zimm-Bragg.

- Regioni elicoidali in catene polipeptidiche. Origine della transizione.

- CD di proteine nel lontano UV. CD indotto. CD nel vicino UV e nel visibile.

- CD di acidi nucleici.

- Transizioni helix-coil in proteine: molten globule. Processo di folding. Entropia conformazionale. Entropia del solvente.

- Termodinamica del processo di solvatazione e dell'effetto idrofobico.

- Contributo dell'acqua alla stabilità conformazionale. Struttura dell'acqua.

- Binding statistico: vari tipi di costanti. Considerazioni statistiche. Numero medio di siti occupati e sua varianza. Grado di saturazione. Linearizzazione della funzione tipo Langmuir (plot di Scatchard). Esempio dell'acido fosforico.

- Energia libera standard di binding.

- Binding cooperativo. Modello di Hill. Modello allosterico. Modello di Adair. Modello di Pauling e sue modificazioni.

- Catalisi enzimatica. Modelli dell'entropia di attivazione. Modello della stabilizzazione del complesso attivato. Cinetiche iperboliche. Grafico di Lineweaver-Burk. Grafico di Hanes. Cinetiche iperboliche ed isoterma di Langmuir. Cinetiche sigmoidali non-cooperative. Cinetiche cooperative. Modello di Hill. Modello MWC.

- Approfondimenti: modello di Langmuir o dei siti indipendenti (saturazione su superficie ed in soluzione, cromatografia di adsorbimento, cinetica di Michelis-Menten, trasporto di soluti attraverso membrane biologiche); principio di Sabatier; stechiometria di binding (Job's Plot).

- Termodinamica dei processi irreversibili. Entropia e freccia del tempo. Definizioni generali della 1a e 2a



legge della termodinamica. Forze e flussi. Produzione di entropia derivante da: un flusso di calore; una reazione chimica; un processo diffusivo. Produzione di entropia in un sistema aperto. Produzione di entropia dovuta a più processi irreversibili. Relazioni di Onsager. Coefficienti fenomenologici. Processi irreversibili vicini all'equilibrio. Campo di validità delle leggi fenomenologiche. Interferenza tra processi. Processi accoppiati. Stati stazionari. Variazione temporale della produzione di entropia. Funzione di dissipazione. Principio della massima produzione di entropia. Evoluzione del sistema nelle regioni non-lineari. Biforcazioni. Processi oscillanti. Ordine generato da processi lontani dall'equilibrio.

Testi adottati: - B. Pispisa, Chimica Fisica Biologica, Aracne ed., 2010

- Appunti, materiale didattico ed esercizi forniti dal docente.

## **CHIMICA INORGANICA AVANZATA - 6 CFU**

**Prof.ssa Silvia Orlanducci**

Concetti di base della chimica dello stato solido. Il legame chimico negli stati condensati. Reticoli cristallini. Solidi ionici, covalenti, molecolari e metalli. Difetti nei solidi.

Cenni sulle proprietà elettroniche dei solidi, struttura a bande, densità degli stati, metalli, isolanti, semiconduttori e drogaggio. Tecniche di caratterizzazione morfologiche, strutturale e composizionale

-Spettroscopia Raman

-Tecniche di diffrazione ai raggi X di composti inorganici e minerali

Materiali di carbonio: cenni storici ed applicazioni

L'elemento carbonio, struttura dell'atomo di carbonio, ibridizzazione, diagramma di stato ed allotropi.

Classificazione dei materiali di carbonio con riferimento al tipo di legame chimico, di struttura, di texture e di organizzazione. I carboni e la grafite di sintesi: carbonizzazione e grafitizzazione. Verranno trattati i diversi materiali di carbonio con particolare attenzione alle tecniche di sintesi e di preparazione, le loro proprietà ed il loro utilizzo.

I materiali studiati saranno: grafite ad alta densità, carboni vetrosi (glassy carbon), grafite pirolitica, fibre di carbonio, carboni porosi e/o attivati, diamante e nanodiamante di sintesi, DLC (diamond like carbon), fullereni, nanotubi di carbonio, grafene, quantum dots di carbonio.

Il corso prevede 2 attività di laboratorio

Testi adottati: Appunti di lezione, Articoli Scientifici. Il materiale didattico presentato a lezione è disponibile sotto forma di dispense scaricabili dal sito del corso o fornite direttamente dal docente.

## **CHIMICA MACROMOLECOLARE - 6 CFU**

**Prof. Gaio Paradossi**

Introduzione ai polimeri. Polimerizzazione a stadi. Polimerizzazione a catena. Aspetti cinetici e probabilistici. Tecnologie di polimerizzazione. Polidispersità. Medie dei pesi molecolari. Distribuzione numerale e ponderale. Polimeri vinilici. Tatticità. Dimensioni medie di una catena disordinata. Catena Gaussiana. Catena semiflessibile. Lunghezza di persistenza. Catena equivalente e lunghezza di Kuhn. Raggio di girazione. Termodinamica delle soluzioni polimeriche. Teoria di Flory - Huggins. Condizioni Theta. Metodi di frazionamento in termini di peso molecolare: Precipitazione frazionata. Cromatografia a permeazione di gel (aspetti termodinamici). Soluzioni polimeriche diluite. Proprietà colligative: Pressione osmotica. Coefficiente del virale. Viscosità. Proprietà meccaniche di polimeri e cenni di teoria dell'elasticità.

Testi adottati: Young and Lovell "Introduction to Polymers" Chapman and Hall

#### **CHIMICA ORGANICA IV - 6 CFU**

**Prof. Gianfranco Ercolani**

Simmetria molecolare e gruppi puntuali di simmetria. Metodi della Meccanica Molecolare. Esplorazione della superficie di energia potenziale. Analisi dei modi normali di vibrazione. Teoria dell'orbitale molecolare: metodi di Hückel e di Hückel esteso, approccio qualitativo. Metodi computazionali quanto-meccanici per lo studio dell'energia e della struttura di specie molecolari di equilibrio e di transizione (calcoli ab initio, semiempirici, e teoria del funzionale densità). Studio dei meccanismi di reazione con metodi non-cinetici. Termodinamica e cinetica delle reazioni organiche. Effetti isotopici. Catalisi Acida e Basica. Equazione di Brønsted. Teorie della cinetica chimica (teoria dello stato di transizione, principio di Bell-Evans-Polanyi, postulato di Hammond, teoria di Marcus). Correlazioni Lineari di Energia Libera.

Testi adottati: Materiale didattico fornito dal docente

#### **CHIMICA ORGANICA V - 6 CFU**

**Prof. Massimo Bietti 4 cfu, Prof.ssa Michela Salamone 2 cfu**

Studio della struttura e della reattività delle principali classi di intermedi reattivi in Chimica Organica: carbocationi, carbanioni, radicali, radicali-ioni, carbeni e nitreni. Analisi dei metodi e delle tecniche per la loro generazione, caratterizzazione e studio della reattività. Applicazioni in procedure sinteticamente utili con riferimento ad esempi della letteratura recente.

Testi adottati: Moss, R. A., Platz, M. S., Jones, jr Reactive Intermediate Chemistry , M. Eds. Wiley-Interscience, 2004; Carey F.A., Sundberg, R. J. Advanced Organic Chemistry Part A and Part B, 5th edition, Springer, 2007; Parsons, An Introduction to Free Radical Chemistry, Blackwell Science, 2000. Esempi dalla letteratura

#### **CHIMICA SOSTENIBILE - 6 CFU**

**Prof. Pierluca Galloni**

Il corso verrà articolato in due parti: una prima parte, dove verrà spiegata la teoria dietro la chimica ecocompatibile e le tecniche che vanno usate per rendere un processo 'green', come catalizzatori organici, solventi ecosostenibile, nuovi processi chimici con elevata efficienza atomica, processi biotecnologici e processi realizzati con metodi avanzati per attivazioni energetici dei reagenti.

Nella seconda parte verranno presentate le tecniche moderne per l'isolamento dei materiali di partenza dalla biomassa (bioraffineria) e le loro modifiche necessarie per renderle utile nella chimica industriale moderna usando processi dedicati e biotecnologici.

Testi adottati: Dispense a cura del docente, e articoli e review di letteratura verranno messi a disposizione degli studenti

#### **CHIMICA TEORICA - 6 CFU**

**Dott. Andrea 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; 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; introduzione ai calcoli misti classico-quantistici  
Testi adottati: Materiale didattico fornito dal docente

#### **DIDATTICA DELLA CHIMICA - 6 CFU**

**Prof. Mariano Venanzi**

Metodologia: Filosofia chimica. Approccio storico. Modelli e modellizzazione. Il laboratorio nella didattica chimica. Rappresentazioni della chimica. Relazioni micro-macro. Curricula didattici. Approcci di contesto. Problem solving. Flipped classroom. Problemi di didattica della chimica. Il modello corpuscolare, Il legame chimico. Equilibrio chimico. Cinetica chimica. Energetica e Termodinamica. Elettrochimica. Laboratorio di didattica della chimica.

Testi adottati: Chemical Education: Towards Research-based practice. Ed. J.K. Gilbert, O. de Jong, R. Justi, D.F. Treagust, Kluwer Acad. Publ. 2003

#### **CHEMOMETRIA ED APPLICAZIONI - 6 CFU**

**Prof. Daniel Oscar Cicero, Dott. Gabriele Magna**

La metabolomica e le applicazioni in biochimica clinica, scienze ambientali, scienze degli alimenti e farmacologia. - Tecniche utilizzate per l'estrazione di metaboliti e l'analisi dei campioni per ottenere dati di metabolomica: HPLC- e GC-MS, NMR. Approfondimenti tecnici di queste spettroscopie per l'analisi di miscele complesse. - Analisi dei dati: metodi univariati e multivariati. Principi di PCA, PLS, OPLS-DA, ROC curves. Introduzione all'uso di software dedicati. Esercitazioni di analisi di dati. - Identificazione di metaboliti utilizzando databases online - Mappatura dei dati di metabolomica nei diversi pathways biochimici - Esempi di applicazione: studi di malattie cardiovascolari, studi di diagnostica nel cancro. - Esercitazioni comprendenti l'uso di GC\_MS e NMR con campioni di prova e analisi dei dati.

#### **ENZIMOLOGIA - 6 CFU**

**Prof.ssa Anna Maria Caccuri**

Catalisi enzimatica: aspetti termodinamici, flessibilità proteica, catalisi acido-basica, elettrostatica, da ioni metallici, covalente. Cinetica dello stato stazionario: significato delle costanti macroscopiche, reazioni a singolo substrato e a due substrati. Inibitori enzimatici reversibili ed irreversibili. Dipendenza della catalisi enzimatica dal pH e dalla temperatura. Cooperatività e regolazione enzimatica. Cinetica dello stato pre-stazionario, determinazione delle costanti microscopiche di una reazione enzimatica. Meccanismo catalitico di alcuni enzimi: proteasi, deidrogenasi, transaminasi, decarbossilasi. Ribozimi.

Testi adottati: A. Fersht: struttura e meccanismi d'azione degli enzimi (Zanichelli); R.H. Garrett: Biochimica (Piccin). Materiale fornito dal docente

#### **MATERIALI NANOSTRUTTURATI - 6 CFU**

**Prof.ssa Silvia Orlanducci**

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

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

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

Gli approcci : bottom-up e top-down.

Tecniche top-down : litografie che utilizzano radiazioni elettromagnetiche , fasci di elettroni, fasci di ioni .

Altre tecniche : nanoimprinting, nanolitografia colloidale ,nanoindentazione tramite AFM , processi dip-pen.

Tecniche meccaniche : macinazione, assottigliamento

Tecniche bottom-up: -nucleazione in fase liquida -riduzione di complessi metallici -spray-drying

-pirolisi -processi sol-gel -reazioni in fase vapore -reazioni in fase solida -nucleazione eterogenea

Processi di funzionalizzazione

Processi di ricopertura

Processi di riempimento

Processi di organizzazione e allineamento di nanofili e nanoparticelle.

Proprietà ed applicazioni delle varie classi di nanostrutture

Caratterizzazioni strutturali, proprietà ed applicazioni di importanti classi di materiali, con particolare riferimento ai nanomateriali di Si e di Carbonio (fullereni, nanotubi, grafene, nanodiamante) ed ad alcuni ossidi : SiO<sub>2</sub> , SnO<sub>2</sub>, ZnO, TiO<sub>2</sub> .

Nanomateriali per sensoristica

Nanomateriali per celle fotovoltaiche DSSC e plastiche

Nanomateriali per catalisi

Testi adottati: Nanomaterials, Nanotechnologies and Design , by Schodek, Ferriera and Ashby , Elsevier ebook ISBN 9780080941530

## **METODI MATEMATICI PER LA CHIMICA - 6 CFU**

**Prof. Carlangelo Liverani**

Spazi di Hilbert, Analisi complessa, Serie e trasformate di Fourier

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

## **NANOSCIENZE - 6 CFU**

**Prof. Mariano Venanzi 4 cfu, Prof.ssa Manuela Scarselli 2 cfu**

Introduzione al corso. Elementi di meccanica quantistica e di meccanica statistica di sistemi nanometrici. Chimica delle nanostrutture: approccio bottom-up e self-assembly. Chimica supramolecolare. Processi di trasferimento di carica. Elettronica molecolare.

Elementi di meccanica quantistica e di meccanica statistica di sistemi nanometrici.

Tecniche sperimentali per lo studio dei sistemi nanometrici.

Microscopia elettronica SEM/ TEM. Scattering elastico/anelastico, spettroscopia a raggi X e ad elettroni (cenni). Principi della microscopia ad effetto tunnel (STM). Il Microscopio a Scansione Tunnel (STM). Microscopia a scansione di forza (AFM). Nuovi materiali del carbonio (nanotubi e grafene). Caratteristiche fisiche, proprietà elettroniche, metodi di sintesi, alcune applicazioni. Nanoparticelle di semiconduttori o metalli, proprietà opto-elettroniche e applicazioni. Possibilità di inserire uno o due argomenti a scelta concordati con gli studenti.

Testi adottati: S. Lindsay, "Introduction to Nanoscience" Oxford University Press, USA, 2009

I file delle lezioni sono resi disponibili sul sito web didattica di Ateneo.

### **SINTESI ASIMMETRICA - 6 CFU**

**Prof.ssa Valeria 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 adottati: Dispense a cura del docente, e articoli e review di letteratura verranno messi a disposizione degli studenti per condivisione su spazio dropbox.

### **SISTEMI NON-COVALENTI. DESIGN ED APPLICAZIONI 6 CFU**

**Prof.ssa Manuela Stefanelli**

Chimica supramolecolare: definizioni, classificazione dei sistemi host-guest, effetto chelato e cooperativo, preorganizzazione e complementarità. Natura delle interazioni non covalenti.

Principali hosts per cationi: eteri corona, podandi, ciptandi, sferandi, calixareni

Hosts per molecole neutre ed anioni.

Sistemi estesi: polimeri di coordinazione, MOFs

Self-Assembly: tecniche principali nei sistemi sintetici

Applicazioni di sistemi supramolecolari in fotochimica, catalisi, sensing

Testi adottati: Materiale didattico fornito dal docente

### **SPETTROSCOPIA MOLECOLARE - 9 CFU**

**Prof. Lorenzo Stella 7 cfu – Prof. Paolo Calligari 2 cfu**

• Spettroscopia di emissione • Spettroscopia risolta nel tempo o Assorbimento transiente • Tempi di vita di fluorescenza • Anisotropia risolta nel tempo • Spettroscopia con luce polarizzata • Dicroismo lineare o Dicroismo circolare • Anisotropia di fluorescenza • Spettroscopia di singola molecola • Microscopia di fluorescenza • Nanoscopie ottiche

Esperienze di laboratorio.

Testi adottati: Jameson, D. M. (2014). Introduction to fluorescence. CRC press.

Il materiale delle lezioni viene fornito agli studenti

### **SPETTROSCOPIA NMR DELLE MOLECOLE ORGANICHE - 6 CFU**

**Prof. Daniel Oscar Cicero**

Uso degli operatori prodotto per la descrizione degli esperimenti NMR

- Esperimenti NMR bidimensionali, teoria e parametri
- Esperimenti omonucleari basati su costanti scalari: COSY e TOCSY. Descrizione e applicazioni.
- Esperimenti omonucleari basati su costanti dipolari: NOESY e ROESY. Descrizione e applicazioni.

- Esperimenti eteronucleari: HSQC, HMQC e HMBC. Descrizione e applicazioni.
- Uso di gradienti di campo nella spettroscopia NMR
- NMR di biomolecole: assegnazione, struttura e dinamica
- Risoluzione di problemi di assegnamento di segnali  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$  utilizzando gli spettri bidimensionali descritti nel corso

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 adottati: materiale provvisto dal docente.

\*\*\*\*\*

LINK <http://www.scienze.uniroma2.it/?cat=625&catParent=175>

Didattica Programmata per il triennio 2022/2025

<http://uniroma2public.gomp.it/PublicData?mode=course&iso=ita&uid=c1d18b1d-6db5-4e8f-a51b-00b5c17de5fa>

Didattica Erogata per l'a.a. 2022/2023

<http://uniroma2public.gomp.it/PublicData?mode=classRoom&iso=ita&uid=0fd802ac-79e2-4e7c-a574-b43f0eae7ed7>