

# Corso di Laurea Magistrale in SCIENZE CHIMICHE (LM-54)

---

*Presidente: Prof.ssa Giovanna Marrazza*

*Dipartimento di Chimica "U. Schiff", via della Lastruccia 3-13, 50019- Sesto Fiorentino (FI)*

*Telefono 055-4573320*

*Fax 055-4574922*

*e-mail: [pres-cdl.chimica@unifi.it](mailto:pres-cdl.chimica@unifi.it)*

*<http://www.chimicamagistrale.unifi.it/>*

---

La Laurea Magistrale in Scienze Chimiche fornisce un approfondimento della formazione chimica di base nei vari settori scientifico disciplinari e competenze specifiche attraverso l'acquisizione di metodologie utili per la comprensione dei fenomeni a livello molecolare. La Laurea Magistrale in Scienze Chimiche si propone di formare uno "scienziato chimico" in grado di poter intervenire su problematiche di alto contenuto scientifico e tecnologico che si presentano sempre più spesso sia nel campo della chimica applicata che nella ricerca di base. Questa Laurea Magistrale si propone di fornire al laureato una approfondita conoscenza delle tematiche chimiche più avanzate, in modo tale da potergli permettere di affrontare i più svariati problemi nei vari settori socio-economici, medico sanitari, ambientali e industriali favorendone così l'inserimento nel mondo produttivo e della ricerca.

## **Articolazione del Corso di Laurea**

La didattica del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche è articolata in semestri per ciascun anno di corso.

Nell'A.A. 2019/2020, le lezioni del **I semestre** avranno inizio il 16 settembre 2019 e avranno termine il 20 dicembre 2019; le lezioni del **II semestre** avranno inizio il 24 febbraio 2020 e avranno termine il 12 giugno 2020.

Il Consiglio di Corso di Laurea in Chimica ha deciso di mantenere unitaria la preparazione successiva alla Laurea triennale costituendo un'unica Laurea Magistrale organizzata in diversi curricula, individuando un gruppo di insegnamenti, comune a tutti i curricula, che tutti gli studenti dovranno seguire per approfondire la cultura chimica di base per poi dedicarsi alla specializzazione in un particolare curriculum.

I curricula proposti sono:

- Curriculum **Struttura, dinamica e reattività chimica**
- Curriculum **Chimica supramolecolare, dei materiali e dei nanosistemi**
- Curriculum **Chimica dell'ambiente e dei beni culturali**
- Curriculum **Chimica delle molecole biologiche**
- Curriculum **Sintesi, struttura e proprietà dei composti organici**

## **Obiettivi formativi**

Il Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche ha come principale obiettivo quello di formare laureati dotati di una solida preparazione culturale nei diversi settori della chimica, con un'avanzata conoscenza delle moderne strumentazioni di misura, delle proprietà delle sostanze chimiche e delle tecniche di analisi dei dati e un'ottima padronanza del metodo scientifico di indagine, in grado cioè di lavorare con ampia autonomia, anche assumendo elevata responsabilità di progetti e strutture.

I laureati nei corsi di laurea magistrale in Scienze Chimiche svolgeranno attività di promozione e sviluppo dell'innovazione scientifica e tecnologica, nonché di gestione e progettazione delle tecnologie; potranno inoltre esercitare attività professionale e funzioni di elevata responsabilità nei settori dell'industria, progettazione, sintesi e caratterizzazione dei nuovi materiali, della salute, della alimentazione, dell'ambiente, dell'energia, della sicurezza, dei beni culturali e della pubblica amministrazione, applicando in autonomia le metodiche disciplinari di indagine acquisite.

Inoltre, le competenze acquisite saranno utili per un inserimento nell'attività di ricerca presso le Università, gli istituti e i centri di ricerca nazionali ed esteri.

## **Requisiti di ammissione e verifica dell'adeguatezza della preparazione**

- a. Titolo di studio. L'accesso al corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche della classe LM-54 delle Lauree Magistrali è consentito a coloro che siano in possesso di una laurea della classe L-27 (Scienze e Tecnologie Chimiche), ex-DM 270/04, oppure di una laurea della classe 21 (Scienze e Tecnologie Chimiche), ex- DM 509/99. L'accesso alla Laurea Magistrale in Scienze Chimiche, classe LM- 54, è altresì consentito a coloro che abbiano acquisito una buona conoscenza scientifica di base nelle discipline matematiche e fisiche e un'adeguata preparazione nelle diverse discipline chimiche e che siano in possesso di altra laurea o diploma universitario di durata triennale, o di altro titolo conseguito all'estero e riconosciuto idoneo dalla struttura didattica ai fini dell'ammissione alla Laurea Magistrale.
- b. Requisiti curriculari. Per accedere alla Laurea Magistrale in Scienze Chimiche, classe LM-54 delle Lauree Magistrali, è necessario possedere: almeno 20 CFU (crediti formativi universitari) nelle discipline matematiche, fisiche e informatiche (SSD MAT/XX, FIS/XX, INF/01, ING-INF/05); almeno 50 CFU nelle discipline chimiche (SSD CHIM/XX), chimiche industriali e tecnologiche (ING-IND/21, ING-IND/22, ING-IND/25) e biochimiche (BIO/10, BIO/11, BIO/12) con attività, sia teoriche che di laboratorio, in ognuno dei SSD CHIM/01, CHIM/02, CHIM/03, CHIM/06; almeno 15 CFU tra tirocinio, attività professionalizzanti, altre attività, ivi incluse la prova finale e la conoscenza di lingua inglese.
- c. Adeguata preparazione individuale. La verifica della preparazione individuale si considera virtualmente assolta per tutti i laureati in possesso di una laurea della classe 21, ex D.M. 509/99, del CdL in Chimica istituito presso l'Università degli studi di Firenze. Per gli altri laureati in possesso dei requisiti curriculari di cui sopra, l'adeguatezza della preparazione verrà verificata da una commissione del Corso di Laurea primariamente sulla base del curriculum di studi presentato con la domanda di valutazione. Qualora il curriculum sia giudicato soddisfacente, la Commissione didattica delibera l'ammissibilità al corso di Laurea Magistrale rilasciando il previsto nulla osta. In caso contrario l'accertamento della preparazione dello studente avviene tramite un colloquio che potrà portare al rilascio del nulla osta per l'ammissione con la proposta di un piano di studi personale in accordo con l'Ordinamento anche in deroga con quanto previsto dal presente Regolamento. Non sono in ogni caso previsti debiti formativi, ovvero obblighi formativi aggiuntivi, al momento dell'accesso.

Il quadro riassuntivo degli insegnamenti previsti per i due anni di corso è mostrato in Tabella I.

**Tabella I. Articolazione del Corso di Laurea**

Per tutti i percorsi sono inoltre previsti 12 CFU di insegnamenti opzionali, 6 CFU per tirocinio, 36 CFU per la prova finale (30 CFU per lavoro sperimentale e 6 CFU per scrittura e discussione).

### Curriculum “Struttura, dinamica e reattività chimica”

I ANNO			
Insegnamento	SSD	CFU	Docente
<b>I Semestre</b>			
Chimica inorganica superiore	CHIM/03	6	M. Lelli
Chimica organica superiore	CHIM/06	6	D. Giomi
Metodi sperimentali di indagine strutturale e dinamica*	CHIM/02	6	M. Pagliai
Metodi matematici e statistici	MAT/07	6	R. Gianni
Struttura elettronica e proprietà molecolari <sup>§</sup>	CHIM/03	6	M. Piccioli, F. Totti
<b>II Semestre</b>			
Metodi strumentali in chimica analitica	CHIM/01	6	I. Palchetti
Chimica fisica superiore	CHIM/02	6	P. Procacci
Laboratorio di metodi sperimentali di indagine strutturale e dinamica <sup>#</sup>	CHIM/02	6	R. Bini
Fotochimica*	CHIM/02	6	A. Feis
Modellistica chimica e dinamica molecolare*	CHIM/02	6	G. Cardini
Spettroscopia molecolare*	CHIM/02	6	R. Bini
Magnetismo molecolare <sup>§</sup>	CHIM/03	6	R. Sessoli, L. Sorace
Chimica teorica*	CHIM/02	6	R. Chelli

II ANNO			
Insegnamento	SSD	CFU	Docente
<b>I Semestre</b>			
Metodi spettroscopici di indagine in chimica inorganica <sup>#</sup>	CHIM/03	6	L. Banci
Strutturistica chimica <sup>#</sup>	CHIM/03	6	C. Bazzicalupi
Chimica fisica dello stato solido <sup>#</sup>	CHIM/02	6	G. Cardini
Solidi molecolari: struttura, dinamica e spettroscopie ottiche e NMR <sup>#</sup>	CHIM/02	6	R. Chelli, E. Ravera

\* n.18 CFU a scelta tra gli insegnamenti contrassegnati

§ n.6 CFU a scelta tra gli insegnamenti contrassegnati

# n.12 CFU a scelta tra gli insegnamenti contrassegnati

## Curriculum “Chimica supramolecolare, dei materiali e dei nanosistemi”

I ANNO			
Insegnamento	SSD	CFU	Docente
<b>I Semestre</b>			
Chimica inorganica superiore	CHIM/03	6	M. Lelli
Chimica organica superiore	CHIM/06	6	D. Giomi
Chimica fisica dei nanosistemi	CHIM/02	6	D. Berti
Chimica supramolecolare	CHIM/03	6	A. Bianchi
Chimica fisica dei sistemi dispersi e delle interfasi*	CHIM/02	6	P. Baglioni
<b>II Semestre</b>			
Metodi strumentali in chimica analitica	CHIM/01	6	I. Palchetti
Chimica fisica superiore	CHIM/02	6	P. Procacci
Chimica fisica delle superfici*	CHIM/02	6	U. Bardi
Tecnologia dei materiali avanzati*	CHIM/02	6	U. Bardi
Laboratorio di nanomateriali*	CHIM/02	6	E. Fratini
Chimica fisica dei sistemi molecolari ordinati*	CHIM/02	6	G. Caminati
Nanomateriali funzionali*	CHIM/02	6	M. Bonini

II ANNO			
Insegnamento	SSD	CFU	Docente
<b>I Semestre</b>			
Dispositivi molecolari e macromolecolari <sup>§</sup>	CHIM/03	6	B. Valtancoli
Materiali inorganici molecolari <sup>§</sup>	CHIM/03	6	A. Bencini
Elettrochimica dei materiali e dei nanosistemi <sup>#</sup>	CHIM/02	6	G. D. Aloisi
Chimica fisica delle formulazioni <sup>#</sup>	CHIM/02	6	P. Lo Nostro
Metodologie chimico fisiche per lo studio di nanosistemi <sup>#</sup>	CHIM/02	6	F. Ridi

\* n.18 CFU a scelta tra gli insegnamenti contrassegnati

# n.6 CFU a scelta tra gli insegnamenti contrassegnati

§ n.6 CFU a scelta tra gli insegnamenti contrassegnati

## Curriculum “Chimica dell'ambiente e dei beni culturali”

I ANNO			
Insegnamento	SSD	CFU	Docente
<b>I Semestre</b>			
Chimica inorganica superiore	CHIM/03	6	M. Lelli
Chimica organica superiore	CHIM/06	6	D. Giomi
Chimica dei processi di biodegradazione	CHIM/03	6	A. Rosato
Chimica fisica per i beni culturali	CHIM/02	6	P. Baglioni
Metodologie analitiche innovative per l'energia sostenibile*	CHIM/01	6	M. Innocenti
<b>II Semestre</b>			
Metodi strumentali in chimica analitica	CHIM/01	6	I. Palchetti
Chimica fisica superiore	CHIM/02	6	P. Procacci
Chimica analitica ambientale componenti inorganici*	CHIM/01	6	R. Traversi, M. Severi
Chimica analitica ambientale componenti organici*	CHIM/01	6	A. Cincinelli
Bioanalitica e applicazioni in campo ambientale, alimentare e biologico#	CHIM/01	6	M. Minunni

II ANNO			
Insegnamento	SSD	CFU	Docente
<b>I Semestre</b>			
Sensori e biosensori <sup>§</sup>	CHIM/01	6	G. Marrazza
Valorizzazione industriale dei rifiuti#	CHIM/04	6	L. Rosi
<b>II Semestre</b>			
Chimica analitica per i beni culturali <sup>§</sup>	CHIM/01	6	M. Minunni
Chimica dell'ambiente e metodologie avanzate di analisi ambientale <sup>§</sup>	CHIM/01	6	M. Del Bubba
Chimica fisica ambientale#	CHIM/02	6	G. Pietraperzia
Chimica verde#	CHIM/06	6	F. Cardona

\* n.12 CFU a scelta tra gli insegnamenti contrassegnati

# n.6 CFU a scelta tra gli insegnamenti contrassegnati

§ n.12 CFU a scelta tra gli insegnamenti contrassegnati

## Curriculum “Chimica delle molecole biologiche”

I ANNO			
Insegnamento	SSD	CFU	Docente
<b>I Semestre</b>			
Chimica inorganica superiore	CHIM/03	6	M. Lelli
Chimica organica superiore <sup>§</sup>	CHIM/06	6	D. Giomi
Biologia strutturale	CHIM/03	6	L. Banci
Biologia molecolare	BIO/11	6	T. Fiaschi
Chimica delle biomolecole <sup>§</sup>	CHIM/06	6	A. M. Papini
<b>II Semestre</b>			
Metodi strumentali in chimica analitica	CHIM/01	6	I. Palchetti
Chimica fisica superiore	CHIM/02	6	P. Procacci
Struttura e reattività di metalloproteine <sup>#</sup>	CHIM/03	6	R. Pierattelli
NMR in biologia strutturale <sup>#</sup>	CHIM/03	6	I. Felli
Biochimica avanzata	BIO/10	6	F. Cencetti
Metabolomica e proteomica strutturale nel drug discovery <sup>#</sup>	CHIM03	6	C. Luchinat, P. Turano

II ANNO			
Insegnamento	SSD	CFU	Docente
<b>I Semestre</b>			
Laboratorio di espressione di metalloproteine <sup>#</sup>	CHIM/03	6	S. Ciofi Baffoni
Laboratorio di risonanze magnetiche <sup>*</sup>	CHIM/03	6	I. Felli
Laboratorio di bioinformatica <sup>*</sup>	CHIM/03	6	A. Rosato

\* n.6 CFU a scelta tra gli insegnamenti contrassegnati

§ n.6 CFU a scelta tra gli insegnamenti contrassegnati

# n.18 CFU a scelta tra gli insegnamenti contrassegnati

## Curriculum “Sintesi, struttura e proprietà dei composti organici”

I ANNO			
Insegnamento	SSD	CFU	Docente
<b>I Semestre</b>			
Chimica inorganica superiore	CHIM/03	6	M. Lelli
Chimica organica superiore	CHIM/06	6	D. Giomi
Sintesi industriali di composti organici	CHIM/04	6	A. Salvini
Chimica organometallica	CHIM/06	6	A. Goti
Chimica delle sostanze organiche naturali*	CHIM/06	6	A. Brandi
Stereochimica*	CHIM/06	6	E. Occhiato
<b>II Semestre</b>			
Chimica fisica superiore	CHIM/02	6	P. Procacci
Metodi strumentali in chimica analitica	CHIM/01	6	I. Palchetti
Metodi di indagine strutturale in chimica organica*	CHIM/06	6	M. Cacciarini, C. Bello
Chimica biorganica*	CHIM/06	6	A. M. Papini
Laboratorio di progettazione e sintesi organica*	CHIM/06	6	F. M. Cordero

II ANNO			
Insegnamento	SSD	CFU	Docente
<b>I Semestre</b>			
Biotrasformazioni in chimica organica <sup>#</sup>	CHIM/06	6	C. Nativi
Chimica organica per i materiali <sup>#</sup>	CHIM/06	6	S. Cicchi
<b>II Semestre</b>			
Stereoselettività in sintesi organica <sup>#</sup>	CHIM/06	6	A. Goti
Laboratorio di sintesi delle sostanze organiche naturali <sup>#</sup>	CHIM/06	6	C. Nativi
Chimica dei composti eterociclici <sup>#</sup>	CHIM/06	6	D. Giomi
Sintesi e reattività dei complessi metallici <sup>#</sup>	CHIM/03	6	C. Giorgi

\* n.12 CFU a scelta tra gli insegnamenti contrassegnati

# n.18 CFU a scelta tra gli insegnamenti contrassegnati

### **Tabella II. Insegnamenti opzionali**

Insegnamento	SSD	CFU	Sem.	Docente
Tutti gli insegnamenti della Laurea Magistrale in Scienze Chimiche				
Modellistica applicata a molecole di interesse biologico (L. M. Biotec. Mol.)	CHIM/02	6	1	P. Procacci
Chimica e tecnologia dei materiali polimerici (Scienze e materiali per la conservazione ed il restauro)	CHIM/04	6	1	A. Salvini
Storia della Chimica e della Fisica (L. M. Scienze fisiche ed Astrofisiche)	FIS/02	6	2	R. Livi P. Lo Nostro E. Bougleux

- 1 CFU (Credito Formativo Universitario) corrisponde a 8 ore di lezione ovvero a 12 ore di esercitazioni e/o laboratorio.

### **Attività formative a scelta dello studente: n. 12 CFU.**

Sono riservati 12 CFU per le attività autonomamente scelte dallo studente. La scelta dei corsi comporta la presentazione di un Piano di Studio, secondo modalità indicate in un successivo paragrafo, che dovrà essere valutato dalla struttura didattica.

### **Prova finale: n. 36 CFU.**

La prova finale per il conseguimento della laurea Magistrale prevede in totale 36 CFU da conseguirsi nell'ambito delle attività biennali. Le attività formative relative alla preparazione della prova finale consistono in un'attività pratica di laboratorio corrispondente a 30 CFU (Prova finale: lavoro sperimentale) da svolgere presso un Dipartimento, Centro o Laboratorio Universitario oppure un Ente pubblico di ricerca o una ditta esterna convenzionata, sotto la guida di un relatore universitario e di uno o più correlatori. L'attività relativa alla prova finale deve essere concordata con un relatore e seguita dal relatore stesso.

Per ottenere il titolo di Dottore Magistrale è previsto inoltre un esame finale consistente nella stesura e nella discussione di un elaborato originale su attività di ricerca sperimentale o teorica di carattere innovativo nel campo delle scienze chimiche. A tale attività (Prova finale: scrittura e discussione, 6 CFU. La valutazione finale è espressa in centodecimi. Agli studenti che raggiungono il voto di laurea di 110 punti può essere attribuita la lode con voto unanime della Commissione.

Per accedere alla prova finale il candidato deve aver acquisito almeno 84 crediti.

### **Altre attività: attività di ricerca o tirocinio formativo, n. 6 CFU.**

6 CFU sono riservati ad attività di ricerca nei laboratori universitari o ad attività di tirocinio formativo presso laboratori universitari o industrie, enti pubblici e privati convenzionati con l'Università i cui nominativi saranno forniti dalla struttura didattica.

### **Modalità di presentazione dei Piani di studio.**

La presentazione dei Piani di Studio avviene durante il I anno di corso entro il mese di novembre. Nel Piano di studio verranno indicati, oltre ai corsi obbligatori riportati nel Manifesto degli Studi, le attività formative a scelta dello studente e le attività di tirocinio. Modifiche al Piano di studio possono comunque essere presentate all'inizio del II anno di corso.

Il Piano presentato sarà valutato dalla struttura didattica competente che prenderà una decisione entro trenta giorni dal termine di scadenza per la presentazione. Il Consiglio della struttura didattica o altro organo competente, concorda con lo studente eventuali modifiche del Piano.

### **Servizi di tutorato attivi**

I componenti della Commissione didattica (<http://www.chimicamagistrale.unifi.it/>) saranno a disposizione, per almeno due ore la settimana, in orari prefissati e secondo le proprie competenze didattico/scientifiche, per rispondere a quesiti posti dagli studenti in merito al contenuto dei corsi e per risolvere eventuali problemi connessi all'organizzazione degli studi. Saranno incoraggiate anche forme di tutorato che facciano uso di mezzi telematici: mezzi informatici e ausili per la didattica a distanza.

### **Obblighi di frequenza**

La frequenza a tutti i corsi è altamente consigliata per un rapido e proficuo apprendimento delle materie insegnate.

Per i corsi di laboratorio la frequenza è obbligatoria e viene certificata con il superamento del relativo esame.

### **Studenti impegnati in attività lavorative e studenti part-time**

Per quanto riguarda gli studenti lavoratori o part-time, il Corso di Laurea prevede la possibilità di immatricolare studenti impegnati contestualmente in altre attività e dichiara la propria disponibilità a collaborare alle iniziative che l'Ateneo si impegna a sviluppare anche mediante corsi e lezioni in orari diversi da quelli previsti nel Manifesto del Corso di Studi.



Modalità di svolgimento degli esami e altre forme di attribuzione dei crediti.

Lo studente acquisisce i crediti previsti per ogni corso di insegnamento con il superamento della prova di esame. In alcuni corsi sono previste verifiche in itinere.

Ogni esame del Corso di Laurea Magistrale in Chimica darà luogo ad una valutazione finale in trentesimi e alla acquisizione dei relativi crediti.

Gli esami ed i colloqui vengono effettuati:

- durante la pausa fra i due semestri.
- ad aprile nel periodo di sospensione delle lezioni
- alla fine del II semestre
- a settembre prima dell'inizio dei corsi dell'A.A. successivo.
- per le attività di tirocinio viene certificato l'avvenuto superamento della prova con un giudizio di idoneità.

### **Calendario dei semestri, delle sessioni di laurea e vacanze ufficiali**

Per l'anno accademico 2019-2020 calendario dei semestri è il seguente:

- I Semestre: 16 settembre 2019 - 20 dicembre 2019
- II Semestre: 24 febbraio 2020 - 12 giugno 2020

Le date per le sessioni di tesi A.A. 2019/2020 verranno pubblicate sul sito del Corso di Laurea.

Vacanze ufficiali durante i periodi di lezione:

- 6 aprile – 17 aprile 2020 (interruzione per le vacanze pasquali)

### **Transizione dagli ordinamenti precedenti all'ordinamento vigente**

Secondo quanto prescritto dal Regolamento Didattico di Ateneo, gli studenti iscritti a un ordinamento pre-vigente possono optare per l'iscrizione all'ordinamento vigente. A tal fine gli studenti presentano domanda di opzione.

Il Consiglio di Corso di Laurea deciderà sul riconoscimento dei CFU delle attività formative documentate dallo studente in base alla coerenza con gli obiettivi formativi del Corso di Laurea.

Il Consiglio del Corso di Laurea, attraverso un'apposita Commissione, vaglia le domande di opzione e riformula in termini di crediti i curricula degli studenti. La validità dei crediti acquisiti viene riconosciuta fino al raggiungimento del numero di crediti dello stesso settore scientifico disciplinare previsti dall'ordinamento didattico vigente.

Nel caso in cui il numero dei crediti acquisiti dallo studente, nell'ordinamento pre-vigente, risulti inferiore al numero dei crediti richiesto dal Regolamento Didattico, la Commissione indica le attività formative necessarie al raggiungimento del numero di CFU richiesti.

Il Consiglio di corso di Laurea può organizzare, se necessario, attività integrative per ogni settore scientifico disciplinare o per gruppi di settori, che potranno essere utilizzate dagli studenti che provengono dai pre-vigenti ordinamenti.

Gli eventuali crediti maturati in esubero, nonché quelli relativi ad insegnamenti per i quali non viene riconosciuta alcuna equipollenza, su richiesta dello studente, verranno considerati a copertura dei crediti attribuiti alle attività formative a scelta dello studente.

Per i passaggi dalle Lauree ex DM 509 alla Laurea ex DM 270 sono predisposte apposite tabelle di riconoscimento (<http://www.chimicamagistrale.unifi.it/>).

### **Servizi alla didattica**

La didattica del Corso di Laurea Magistrale in Chimica si svolgerà presso il Polo Scientifico di Sesto Fiorentino dell'Università di Firenze.

Il Polo Scientifico di Sesto è collegato con Firenze, con la Stazioni di Firenze Rifredi e di Sesto Fiorentino (Centrale e Zambra) e con Calenzano grazie alle linee Ataf 59, 66. Percorsi e orari potranno essere trovati sulle pagine web: <http://www.polosci.unifi.it>, <http://www.ataf.net>, <http://www.trenitalia.it>.

Il Polo Scientifico è dotato di un servizio mensa e di un impianto sportivo (campo da basket, calcio, calcio a cinque, pallavolo, tennis, rugby e palestra, per informazioni <http://www.cus.firenze.it>).

Il Centro Linguistico di Ateneo organizza periodicamente presso il Polo Scientifico corsi di lingua inglese di livello elementare e avanzato (per informazioni <http://www.cla.unifi.it>).

## **Aule**

Presso il Polo Scientifico di Sesto Fiorentino, via Gilberto Bernardini, 6 (Blocco Aule) e Presso il Dipartimento di Chimica "Ugo Schiff", via della Lastruccia, 3-13

## **Laboratori**

Presso il Polo Scientifico di Sesto Fiorentino:

Dipartimento di Chimica "Ugo Schiff", via della Lastruccia, 3-13

Dipartimento di Fisica, via Sansone, 1.

## **Biblioteca di Chimica**

La Biblioteca di Chimica si trova in via Gilberto Bernardini 6, presso il Polo Scientifico di Sesto Fiorentino (<http://www.sba.unifi.it/CMpro-v-p-347.html>). Sono a disposizione degli studenti alcuni terminali per ricerche di tipo bibliografico.

## **Dipartimenti**

Le strutture del Dipartimento "Ugo Schiff" sono a disposizione degli studenti del CdL in Chimica e sono di fondamentale ausilio alle attività didattiche del CdL. Presso queste strutture i docenti sono a disposizione degli studenti negli orari di ricevimento e per dimostrazioni ed esercitazioni su apparecchiature di ricerca: Dipartimento di Chimica "Ugo Schiff", via della Lastruccia, 3-13.

## **Aula Computer**

Il Corso di Laurea mette a disposizione degli studenti che intendono svolgere attività didattiche autonome, ricerche in internet, posta elettronica, mezzi informatici adeguati in un'aula computer presso il Blocco aule, via Gilberto Bernardini, 6.

L'uso dei computer è gratuito e sotto la sorveglianza di studenti incaricati dal responsabile della struttura.

## **Programmi Erasmus+**

Gli studenti che intendono trascorrere un periodo di studio all'estero nell'ambito del programma Erasmus+ dovranno sottoporre il piano di studi al CdL prima di partire. Il responsabile per la Chimica del programma Erasmus+ è la Prof.ssa Anna Maria Papini (Dipartimento di Chimica "Ugo Schiff", [annamaria.papini@unifi.it](mailto:annamaria.papini@unifi.it)).

## **Spazio studenti**

Nel Polo Scientifico di Sesto Fiorentino sono predisposti ampi spazi di studio a disposizione degli studenti presso il Blocco aule e il Dipartimento di Chimica.

## **Argomenti dei corsi**

Brevi riassunti sulla natura e sui contenuti dei corsi attivati sono riportati di seguito. I programmi dettagliati possono essere ottenuti rivolgendosi ai singoli docenti.

### **Bioanalitica e applicazioni in campo ambientale, alimentare e biologico**

*M. Minunni*

Introduzione. Caratteristiche dei metodi bioanalitici ed utilizzo di saggi in situ. Metodi spettroscopici per la caratterizzazione di matrici. Utilizzo di enzimi per misure bioanalitiche; quantificazione di enzimi e dei loro substrati. Classificazione di metodi bioanalitici. Utilizzo di Anticorpi per misure bioanalitiche. Molecole biomimetiche e loro applicazione a saggi bioanalitici. Polimeri a stampo molecolare (MIP). Metodi elettroforetici. Cromatografia di biomolecole. (Bio)sensori enzimatici (catalitici) e di affinità (immuno sensori ed aptasensori).

### **Biochimica avanzata**

*F. Cencetti*

Meccanismi di base della comunicazione cellulare: ormoni, neurotrasmettitori, mediatori locali. Principali neurotrasmettitori, loro metabolismo e tipologia di recettori implicati nella loro azione. Colesterolo come precursore di ormoni steroidei. Metabolismo dei principali ormoni steroidei, loro meccanismo d'azione ed effetti biologici. Biosintesi di ormoni tiroidei e loro modalità di azione. Eicosanoidi: loro metabolismo ed attività biologica. Principali recettori di membrana, loro modalità di trasduzione del segnale e meccanismi di controllo funzionale. Recettori intracellulari. Controllo di qualità nella sintesi e nel folding delle proteine in vivo, loro maturazione e modificazioni co- e post-traduzionali: glicosilazione e lipidazione di proteine. Degradazione controllata delle proteine: ruolo del sistema ubiquitina/proteasoma.

### **Biologia molecolare**

*T. Fiaschi*

La cellula: procarioti ed eucarioti. Cicli riproduttivi della cellula: mitosi e meiosi. Struttura e funzione della membrana plasmatica. Il trasporto attivo e passivo di membrana. L'organizzazione interna della cellula: gli organuli intracellulari. Struttura e funzione del DNA. DNA codificante e non codificante: ruoli e linguaggi. Le basi molecolari dell'ereditarietà e la duplicazione del DNA. Il codice genetico. Le mutazioni geniche. La trascrizione genica. Il codice genetico viene tradotto in proteina: la traduzione. Le modificazioni post-traduzionali delle proteine: meccanismi e ruolo biologico. Il controllo dell'espressione genica. La compartimentalizzazione cellulare: sintesi e modificazione delle proteine e loro smistamento verso i vari organuli subcellulari. Il citoscheletro: struttura dinamica e regolazione dei filamenti del citoscheletro. I motori molecolari. Meccanismi di motilità cellulare. Caratteristiche delle cellule tumorali, oncosoppressori e protooncogeni. Caratteristiche delle cellule staminali.

### **Biologia Strutturale**

*L. Banci*

Elementi di struttura secondaria delle proteine. Angoli torsionali e plot di Ramachandran. Motivi strutturali. Principali fold proteici e classificazione strutturale delle proteine. Protein data Bank e varie banche dati. Proprietà delle membrane e loro interazioni con proteine. Il processo di folding delle proteine e i fattori che lo determinano. Lo stato denaturato e lo stato di molten globule. Metodologie per lo studio del folding e modelli per descriverlo. Il processo di folding in vivo. Chaperoni molecolari. Processi di aggregazione proteica e formazione di fibrille. Flessibilità e proprietà dinamiche delle proteine. Proprietà strutturali del DNA e interazioni proteina-DNA. Proprietà strutturali del RNA. Metodologie per la caratterizzazione strutturale e dinamica di macromolecole in cristalli, in soluzione, in cellule. Introduzione alle tecniche: spettroscopia NMR, X-ray e microscopia elettronica. Loro utilizzo per la caratterizzazione strutturale e dinamica di biomolecole. Tecniche strutturali integrate per la biologia strutturale a livello cellulare. Il corso prevede esercitazioni al computer e a spettrometri NMR.

## **Biotrasformazioni in chimica organica**

*C. Nativi*

Biotrasformazioni: impieghi e limitazioni. Sintoni chirali. Selettività degli enzimi. Modelli di interpretazione. Classificazione degli enzimi. Enzimi idrolitici: meccanismo e campi di applicazione. Enzimi idrolitici: esterasi. Esempi ed applicazioni. Meso trick. Enzimi idrolitici: lipasi. Esempi ed applicazioni. Risoluzione cinetica. Risoluzione cinetica dinamica. Reazioni in mezzo non acquoso. Ossido-riduttasi: uso di enzimi isolati, rigenerazione del cofattore. Ossidoriduttasi: uso di microrganismi, lievito di birra. Stereoselettività. Sistemi vegetali. Ossido-riduttasi: ossidazione di composti aromatici a dioli ed applicazioni sintetiche. Aldolasi, formazione di nuovi legami C-C. Bioriduzioni non convenzionali: enzimi immobilizzati, conformational engineering. Enzimi modificati (modifiche chimiche e site directed mutagenesis). Cellule artificiali. Anticorpi catalitici. Impiego di enzimi in liquidi ionici. Esercitazione in laboratorio su una risoluzione cinetica enzimatica.

## **Chimica analitica ambientale - componenti inorganici**

*R. Traversi, M. Severi*

Approfondimento di metodologie analitiche innovative per la determinazione di componenti inorganici e loro applicazione a matrici reali. 1. Tecniche di campionamento aerosol atmosferico e trattamento del campione (mineralizzazione con sistemi a micro-onde, bagno ad ultrasuoni), differenti tipi di estrazione degli analiti e controllo dei bianchi. 2. Analisi chimica dei campioni per cromatografia ionica (IC), assorbimento atomico con fiamma (F-AAS) e fornello di grafite (ET-AAS), spettrofotometria di emissione atomica con plasma (ICP-AES) e analisi con la tecnica della generazione di idruri (HG-AAS). Standard e materiali certificati. Tutte le tecniche analitiche presentate sono applicate su campioni reali durante le esercitazioni di laboratorio.

## **Chimica analitica ambientale - componenti organici**

*A. Cincinelli*

Contaminanti organici persistenti, proprietà chimico-fisiche e tossiche. Analisi dei composti organici in matrici reali (acqua, suolo, aria, biota e alimenti). Tecniche di campionamento per analisi di acqua, atmosfera, suolo. Conservazione e pretrattamento del campione. Trattamento del campione: procedure di estrazione (es.: liquido/liquido, liquido/solido, estrazione in fase solida (SPE), microestrazione in fase solida (SPME), accelerated solvent extraction (ASE)). Concentrazione e clean-up. Separazione delle varie classi di contaminanti organici. Analisi strumentale. Principi di cromatografia. Gas-cromatografia (GC), gas-cromatografia accoppiata a spettrometria di massa (GC-MS). Cromatografia liquida ad alta pressione (HPLC). Messa a punto di un metodo analitico. Accuratezza del metodo. Materiali di riferimento, campioni certificati. Bianchi. Sensibilità. Limite di rilevabilità. Calibrazione. Valutazione del rischio. Curve di mescolamento. Back-trajectories. Attività di laboratorio: Campionamento di acque superficiali, aria e suolo. Trattamento dei campioni raccolti (matrici ambientali) e prodotti alimentari. Estrazione degli analiti con varie tecniche di estrazione. Purificazione del campione. Analisi degli estratti organici mediante HPLC, GC, GC-MS, GC-MS-MS. Elaborazione dei dati e relazione finale per l'analisi dei campioni reali. Misure Carbonio totale ed elementare.

## **Chimica analitica per i beni culturali**

*M. Minunni*

La chimica e i beni culturali: introduzione ai materiali di interesse nel campo dei beni culturali e alle principali tecniche pittoriche e artistiche. I pigmenti, i leganti pittorici (leganti polisaccaridici, proteine e oli siccativi), resine terpeniche. Preparazione e analisi di sezioni lucide. Strategie di intervento nell'ambito di un cantiere di restauro. Strategie di campionamento: analisi invasive, microinvasive e non invasive. Tecniche analitiche e loro applicazioni nel campo dei beni culturali: la microscopia ottica, analisi e percezione del colore, la spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier (FTIR), la microscopia elettronica a scansione (SEM) accoppiata con microsonda per analisi di raggi x a dispersione di energia (EDX), analisi cromatografica e spettrometria di massa, analisi mediante spettrometria di massa di ioni secondari con analizzatore a tempo di volo (TOF-SIMS), analisi mediante diffrazione di raggi X (XRD) e fluorescenza di raggi X (XRF), datazione al radiocarbonio. La descrizione delle suddette tecniche analitiche sarà corredata da esempi applicativi relativi a manufatti reali e a cantieri di restauro e da alcune esercitazioni dimostrative di laboratorio in cui verranno analizzati campioni appartenenti a manufatti reali.

## **Chimica biorganica**

*A. M. Papini*

A partire dalla sintesi di peptidi, peptidomimetici e di molecole organiche biomimetiche in generale, fino alla sintesi di proteine tramite chemical ligation o strategie semi-sintetiche saranno discusse una serie di tematiche fondamentali per chi vorrà interessarsi allo studio del ruolo delle proteine nelle condizioni fisiologiche e patologiche degli organismi viventi. Partendo dallo studio dell'ossitocina e dell'insulina saranno presentati i metodi più all'avanguardia per aumentare la biodisponibilità e la stabilità metabolica di peptidi e proteine come farmaci. Inoltre, lo studente potrà effettuare la sintesi di un amminoacido modificato protetto ortogonalmente per la sintesi di un peptide modello e relativo saggio immunochimico della molecola biomimetica sintetizzata per comprendere la prospettiva di un laboratorio di ricerca multidisciplinare "from bench to bedside". Verranno mostrate strumentazioni all'avanguardia per sintesi parallele e multiple anche mediate da microonde e per metodologie analitiche di purificazione, monitoraggio e caratterizzazione di peptidi e proteine dalla scala di laboratorio fino alla scala industriale.

## **Chimica dei composti eterociclici**

*D. Giomi*

Nomenclatura e classificazione dei composti eterociclici. Eterocicli aromatici: sistemi penta- e esa-atomici mononucleari e benzocondensati. Criteri di valutazione dell'aromaticità. Reattività e tautomeria. Eterocicli non aromatici. Sintesi: reazioni di ciclizzazione e reazioni pericicliche (cicloaddizioni 1,3-dipolari, Etero Diels-Alder e [2+2], reazioni chelotropiche e elettrocicliche). Eterocicli esaatomici, mononucleari e benzocondensati, con un eteroatomo: sintesi, reattività e applicazioni sintetiche. Eterocicli pentaatomici, mononucleari e benzocondensati, con un eteroatomo: sintesi, reattività e applicazioni sintetiche. Eterocicli penta- e esa-atomici, mononucleari e benzocondensati, con due o più eteroatomi: sintesi, reattività e applicazioni sintetiche. Eterocicli tri-, tetra- ed epta-atomici.

## **Chimica dei processi di biodegradazione**

*A. Rosato*

Classificazione degli organismi viventi. Struttura della cellula. La membrana cellulare. Il metabolismo cellulare. Fonti di energia. Respirazione e fotosintesi. La metanogenesi. La sintrofia. Monossigenasi, Diossigenasi. Il compostaggio. Biodegradazione della lignina. Degradazione anaerobica di composti aromatici. Dealogenazione. La regolazione dell'espressione. Directed evolution. Il biomonitoraggio. Biorimediazione. Interazione microorganismi-metalli pesanti. Metalli essenziali e non. Inquinamento da metalli pesanti. Meccanismi di resistenza ai metalli pesanti. La biodepurazione delle acque. La potabilizzazione delle acque. Gli antibiotici. Identificazione di microorganismi (cenni).

## **Chimica dell'ambiente e metodologie avanzate di analisi ambientale**

*M. Del Bubba*

Introduzione: che cos'è la chimica dell'ambiente, contaminazione ed inquinamento. Ciclo bio-geochimico del carbonio. Ciclo bio-geochimico dell'azoto. Ciclo bio-geochimico del fosforo. Ciclo bio-geochimico dello zolfo. Inquinamento delle acque: i cicli bio-geochimici degli elementi per la depurazione delle acque, normativa sugli scarichi, direttive europee. Metodi di depurazione e potabilizzazione delle acque. Il suolo: inquinamento del suolo in Europa, legislazione in materia di protezione del suolo, tecniche di bonifica di suoli contaminati. I rifiuti: legislazione in materia di gestione dei rifiuti, produzione dei rifiuti in Europa, raccolta differenziata, metodi di trattamento, riciclaggio e smaltimento.

## **Chimica delle biomolecole**

*A. M. Papini*

Introduzione alle classi di biomolecole e correlazione tra caratteristiche strutturali delle biomolecole e loro attività biologica. Farmaci, profarmaci e loro target biologici. Enzimi come bersagli di farmaci. Meccanismi dell'infiammazione e principali mediatori. FANS, inibitori di COX-1 e COX-2, peptidasi: ruolo biologico e stati patologici correlati. ACEinibitori. Recettori come bersagli di farmaci. Meccanismo molecolare dei recettori oppioidi. Struttura e reattività di molecole e proteine dolci, caratteristiche strutturali determinanti nell'interazione con il recettore. Approccio farmacologico e approccio biochimico allo studio del sistema

recettoriale. Concetto di agonista ed antagonista. Principi di farmacocinetica e farmacodinamica. Metabolismo di xenobiotici. Individuazione di fingerprint amminoacidici: tecniche HPLC, UPLC, MS-MS. Diffusione ed effetti sul sistema endocrino. Principali patologie. Laboratorio: Risoluzione di sequenze peptidiche mediante analisi HPLC-MS e MS-MS. Fingerprint amminoacidico e peptidico ottenuto da analisi di sieri patologici mediante tecnica UPLC-UV. Sintesi di metaboliti e loro determinazione in fluidi biologici di condizioni patologiche.

### **Chimica delle sostanze organiche naturali**

#### *A. Brandi*

Proprietà dei prodotti naturali e cenni storici. Il metabolismo primario e secondario. Le reazioni biochimiche ed i meccanismi delle reazioni organiche. Le principali vie del metabolismo secondario. La via dell'acetato. L'acetilcoenzima A. Acidi grassi. La via dei polichetidi. Le prostaglandine. Il cammino dell'acido mevalonico ed i terpeni. Loro biosintesi. L'unità isoprenica, emiterpenoidi, monoterpenoidi, sesquiterpenoidi, diterpenoidi, squalene, triterpenoidi, carotenoidi. Gli steroidi: steroli, fitosteroli, acidi biliari, ormoni sessuali e della corteccia surrenale (corticosteroidi), glicosidi cardiaci e vitamina D. Il cammino dell'acido shikimico e la sua biosintesi. Alcaloidi: cenni sulle classi principali. Biosintesi e sistematica. I  $\beta$ -lattami.

### **Chimica fisica ambientale**

#### *G. Pietraperzia*

Evoluzione della Terra. Misure di composizione atmosferica. La pressione atmosferica. Trasporto atmosferico: flusso geostrofico, circolazione generale, trasporto verticale, turbolenza. Cicli geochimici. L'effetto serra. Aerosol. Richiami di cinetica chimica. Ozono stratosferico. Potere ossidante della troposfera. Inquinamento da ozono. Piogge acide. Ciclo idrologico. Proprietà chimico-fisiche dell'acqua e delle sue soluzioni. Stratificazione termica e overturn convettivo. Processi chimici e biologici in acque naturali. O<sub>2</sub> e CO<sub>2</sub> nelle acque. Criosfera. Termodinamica della condensazione. Gli oceani e la dinamica delle correnti oceaniche. El Niño (ENSO). Ciclo del P, dello S e dell'energia.

### **Chimica fisica dei nanosistemi**

#### *D. Berti*

Dominio di scala nanometrico e parametri rilevanti ai fini della sua caratterizzazione. Stabilizzazione di nanostrutture in soluzione. Nanostrutture zero-dimensionali: nanoparticelle. Sintesi tramite nucleazione omogenea, eterogenea ed in fasi confinate. Nanometalli, Quantum dots e Ferrofluidi: preparazione e proprietà chimico-fisiche. Nanostrutture unidimensionali: nanorods, nanowires, Nanotubi di C lipidici. Nanostrutture da Self assembly anfifilico

### **Chimica fisica dei sistemi dispersi e delle interfaci**

#### *P. Baglioni*

Introduzione ai sistemi dispersi e colloidali. Tecniche di indagine sperimentali per la Soft Matter. Controllo di stabilità di dispersioni colloidali. Soluzioni Polimeriche Tensione superficiale e wetting. Adsorbimento all'interfase ed aggregazione anfifilica. Emulsioni e Microemulsioni. Concetti di Soft Matter applicati in Biologia.

### **Chimica fisica dei sistemi molecolari ordinati**

#### *G. Caminati*

Moderne metodologie per la costruzione di sistemi bidimensionali ordinati. Fenomeni chimico-fisici all'interfase, principi dell'adsorbimento fisico e chimico. Realizzazione e caratterizzazione di nanomateriali funzionali ottenuti sia per deposizione da fase vapore che da soluzione con tecniche di costruzione molecolare. Applicazione a dispositivi molecolari per nanoelettronica, displays e LED, sensori e celle fotovoltaiche. Alcuni dei dispositivi illustrati saranno realizzati e caratterizzati in laboratorio.

### **Chimica fisica delle formulazioni**

#### *P. Lo Nostro*

Richiami di Chimica Fisica dei Colloidi e dei Nanosistemi. Metodologie sperimentali. Tensioattivi, diagrammi di fase di sistemi anfifilici, sistemi aggregati (micelle, vescicole, ecc.), parametro di impacchettamento, HLB,

polimeri in soluzione e alle interfacce. Interazioni intermolecolari. Parametri di solubilità soluto-solvente. Emulsioni e microemulsioni. Gel fisici e chimici Termodinamica di swelling. Proprietà chimico-fisiche dei formulati. Principi della scienza delle formulazioni. Formulazioni per uso cosmetico, farmaceutico, alimentare: composizione e proprietà. Formulazioni innovative. Materiali funzionali avanzati e biomateriali.

### **Chimica fisica delle superfici**

*U. Bardi*

Proprietà dei materiali solidi e loro relazione alla struttura elettronica (elettroni nei solidi; cenni di teoria delle bande; densità degli stati; work function). Struttura e proprietà della superficie dei solidi. Fenomeni chimico fisici all'interfase solido/gas. Adsorbimento. Catalisi eterogenea. Descrizione delle principali tecniche sperimentali per lo studio delle superfici solide: spettroscopia di fotoelettroni, cinetiche di desorbimento, scattering di ioni, diffrazione di elettroni, microscopia a scansione a effetto tunnel. Laboratorio: interpretazione di dati sperimentali di cinetiche interfacciali e analisi di superfici di materiali. Proprietà e caratteristiche dei film sottili, metodi di deposizione e di analisi

### **Chimica fisica dello stato solido**

*G. Cardini*

Il corso introduce alcuni aspetti della chimica fisica dello stato solido e in particolare dei cristalli. Gli argomenti principali sono: teorema di Bloch e sue implicazioni, dinamica reticolare e dinamica molecolare

### **Chimica fisica per i beni culturali**

*P. Baglioni*

Teoria: Superfici, bagnabilità ed angoli di contatto, suzione capillare, equazione di Young-Laplace, Kelvin e Washburn. Chimica delle pitture murali e su tavola lignea e tela. Colorimetria: aspetti fondamentali. Principi generali di spettroscopia UV-vis e di fluorescenza ed applicazioni nel campo dei beni culturali.

Laboratorio: esecuzione di cinque esperienze su suzione capillare di materiali porosi d'interesse artistico-architettonico, spettri UV-vis di inchiostri e coloranti, adsorbimento solido-liquido, sedimentazione in dispersioni solido-liquido, colorimetria.

### **Chimica fisica superiore**

*P. Procacci*

Chimica Quantistica: Richiami della teoria Hartree Fock. Energia di correlazione elettronica. Metodo Moeller-Plesset. Complessi molecolari e Basis set superposition error. Metodi semiempirici. Metodi DFT. Metodo del dielettrico continuo (PCM). Calcolo di proprietà molecolari. Meccanica Statistica: Insiemi statistici. Potenziali termodinamici. Teorema del viriale. Fluttuazioni. Tecniche computazionali. Proprietà strutturali in sistemi complessi.

### **Chimica inorganica superiore**

*M. Lelli*

Richiami sui concetti principali della Chimica Quantistica, Teoria dei Gruppi e sulla struttura elettronica di atomi polielettronici. L'accoppiamento spin-orbita debole (schema Russell-Saunders) e forte (accoppiamento J-J). L'orbitale molecolare. Il legame chimico e il legame di coordinazione. Elementi di campo cristallino e di campo dei leganti. Principi di magnetismo. Equazione di Curie. Equazione di van Vleck. Lo spettro elettromagnetico e le varie tecniche spettroscopiche. Principi di base delle spettroscopie di risonanza magnetica elettronica e nucleare. La spettroscopia elettronica. Cenni alle spettroscopie a raggi X e Mössbauer.

### **Chimica organometallica**

*A. Goti*

Derivati di organozinco ed organomercurio. Derivati organometallici degli elementi di transizione. Principi generali. Scambio di legante, addizione ossidativa, eliminazione riduttiva, inserzione intramolecolare, beta-eliminazione, attacco nucleofilo a leganti organici insaturi. Reazioni di complessi  $\pi$ -alchilici. Reazioni di complessi  $\sigma$  con leganti alchene, alchino, allile, arene. Reattività di metallo-carbeni di Fischer e di Schrock. Reazione di metatesi degli alcheni e correlate.

## **Chimica organica per i materiali**

*S. Cicchi*

Il corso ha lo scopo di illustrare le caratteristiche e gli approcci sintetici ad alcune classi di materiali organici e come questi trovino applicazione sia in campo biomedico che per la produzione di dispositivi. Dopo un breve excursus storico, ogni capitolo prevede la trattazione dei metodi di produzione e di come la funzionalizzazione del materiale consenta la modulazione delle sue proprietà. Click Chemistry: definizione e vari esempi di applicazione. Dendrimeri: caratteristiche, approcci sintetici, applicazioni. Fullereni: descrizione della struttura e delle loro proprietà; reattività ed applicazione. Nanotubi di carbonio: Struttura, metodi di produzione e reattività; funzionalizzazione delle pareti, applicazioni nell'ambito dei materiali ed in ambito biomedico. Grafene: struttura e metodi di produzione (grafene ossido, grafene ossido ridotto, metodi meccanici e chimici). Reattività e funzionalizzazione; applicazioni

## **Chimica organica superiore**

*D. Giomi*

Metodi di indagine dei meccanismi di reazione in chimica organica. Classificazione delle reazioni organiche. Profili cinetici, ordine di reazione e moleolarità. Controllo cinetico e termodinamico. Misure cinetiche. Espressioni cinetiche generali. Postulato di Hammond. Approssimazione dello stato stazionario. Principio di Curtin-Hammett. Tecniche isotopiche. Effetti cinetici isotopici primari e secondari. Studio di intermedi. Correlazioni lineari di energia libera. Equazione di Hammett. Deviazioni up e down. Aspetti stereochimici. Studio meccanicistico di alcune classi di reazioni. Trasposizioni molecolari. Eliminazioni. Sostituzioni nucleofile al carbonio saturo. Studio delle reazioni pericicliche. Definizione e classificazione. Studio topologico. Approcci teorici. Reattività e selettività.

## **Chimica supramolecolare**

*A. Bianchi*

Chimica molecolare e supramolecolare. Molecole ed aggregati supramolecolari. Le forze che governano la formazione degli aggregati supramolecolari. Molecole macrocicliche ed acicliche quali recettori di cationi, anioni e molecole neutre. Aspetti termodinamici e cinetici relativi alla formazione degli addotti supramolecolari. Struttura delle specie supramolecolari. Relazioni proprietà-struttura e design molecolare. Riconoscimento molecolare. Self-assembly. Reattività e catalisi supramolecolare.

## **Chimica Teorica**

*R. Chelli*

Stati quantici e complessioni. Insieme microcanonico. Legge di distribuzione Maxwell-Boltzmann. Funzione di partizione. Entropia. Medie d'insieme. Approccio statistico a grandezze termodinamiche. Insieme canonico. Calcolo quanto-meccanico di funzioni di partizione. Calore specifico di gas e solidi. Miscele ideali e regolari. Costanti di equilibrio. Spazio delle fasi. Integrale delle fasi. Statistiche di Bose-Einstein e Fermi-Dirac. Termodinamica di nonequilibrio. Esercitazioni al calcolatore.

## **Chimica verde**

*F. Cardona*

Il corso intende fornire agli studenti una panoramica su conoscenze, stato attuale e prospettive future del modo di operare trasformazioni chimiche per l'ambiente, ovvero in maniera eco-compatibile e in considerazione di uno sviluppo sostenibile, secondo i principi della cosiddetta Chimica Verde ("Green Chemistry"). Saranno considerati principalmente processi della chimica organica di sintesi e saranno discusse le alternative possibili con esempi reali tratti dalla letteratura chimica.

## **Dispositivi molecolari e macromolecolari**

*B. Valtancoli*

Macchine molecolari e macromolecolari: approccio "top-down" e "bottom-up" per la costruzione di nanostrutture. Esempi di macchine molecolari biologiche e artificiali. Input per il funzionamento di macchine molecolari: elettroni, protoni ed altri stimoli. Elettronica e fotonica a livello molecolare. Interruttori (switches) molecolari semplici e complessi. Implementazione delle funzioni logiche fondamentali (YES, NOT,



AND, OR, XOR) con sistemi supramolecolari. Autoassemblaggio guidato da ioni metallici di quadrati, cilindri e scatole molecolari, catenani, sistemi a scaffale, a scala e a griglia, elicati, capsule e polimeri supramolecolari. Nanoreattori auto assemblati tramite forze deboli e/o legami di coordinazione. Loro impiego in catalisi. Composti fluorescenti e loro aspetti terapeutici: fluoro immunologia e terapia fotodinamica.

### **Elettrochimica dei materiali e dei nanosistemi**

*G. D. Aloisi*

Principi di termodinamica elettrochimica: equazione di Nernst. Potenziale elettrochimico. Interfasi polarizzabili e non polarizzabili. Il doppio strato. Trasporto di massa in soluzione. Stadi elementari di un processo elettrochimico. Cinetica elettrochimica. Tecniche elettrochimiche a potenziale controllato. Tecniche microscopiche e spettroscopiche per l'indagine superficiale sotto il controllo del potenziale: FTIR, STM e AFM in-situ. Elettrodeposizione: termodinamica e cinetica per la deposizione elettrochimica. Elettrocristallizzazione di metalli. Nanostrutture ottenibili per via elettrochimica. Corrosione: principi di base. Diagrammi di Evans. Prevenzione della corrosione. Passivazione

### **Fotochimica**

*A. Feis*

Fondamenti di fotochimica. Interazioni luce/molecola. Stati molecolari elettronici e vibrazionali. Transizioni elettroniche radiative e non radiative. Metodi sperimentali per lo studio degli stati eccitati: spettroscopie stazionarie e risolte in tempo; metodi ottici e metodi fototermici. Reattività degli stati eccitati. Fotoisomerizzazione. Fotodissociazione. Reazioni fotochimiche di trasferimento di elettrone e di trasferimento di protone. Reazioni fotochimiche organiche. Fotochimica dell'ozono stratosferico. Sistemi fotosintetici naturali. Attività di laboratorio

### **Laboratorio di bioinformatica**

*A. Rosato*

La bioinformatica consiste nello sviluppo e implementazione di metodi e strumenti computazionali per gestire, decifrare e interpretare la grande quantità di dati biomolecolari che sono continuamente prodotti nei laboratori di tutto il mondo. La bioinformatica funge da ponte tra i dati sperimentali e lo sviluppo di nuova conoscenza biologica.

Lo scopo del corso è consentire agli studenti di familiarizzare con un numero significativo di strumenti di bioinformatica e database; capire i metodi computazionali dietro di loro; essere in grado di sfruttare a fondo le capacità degli strumenti; implementare, eseguire e interpretare i risultati di un insieme di analisi bioinformatiche.

Il corso consisterà in lezioni ed esercitazioni relative ai seguenti argomenti: server e web server; database; accesso ai dati tramite queries; sequenza genica e proteica; allineamenti di sequenze; profili di sequenze; metodi di clustering; allineamenti strutturali; relazione struttura-funzione in proteine; interazioni proteiche; network biologici: calcolo, visualizzazione e analisi; metodi di modeling strutturale.

### **Laboratorio di espressione di metalloproteine**

*S. Ciofi Baffoni*

Il programma del corso affronterà le tecniche di espressione eterologa di proteine, dal DNA genomico all'isolamento della proteina: basilari procedure di estrazione e di clonaggio di geni; le tecniche di over-espressione proteica in organismi batterici e in sistemi cell-free; tecniche di purificazione di proteine; procedure in vivo e in vitro di inserzione di metalli in metallo proteine; conseguimento di marcatura isotopica uniforme e selettiva in proteine over-esprese. La spettroscopia di dicroismo circolare sarà discussa nell'analizzare le proprietà di folding di proteine e metallo proteine. Gli argomenti del corso saranno trattati attraverso lezioni frontali ed esercitazioni di laboratorio.

### **Laboratorio di metodi sperimentali di indagine strutturale e dinamica**

*R. Bini*

Lezioni ed esercitazioni di laboratorio riguardanti applicazioni specifiche di quanto trattato nel corso "Metodi sperimentali di indagine strutturale e dinamica": Introduzione alla spettroscopia laser ed elementi di ottica non lineare. Dinamica di stati eccitati e spettroscopia transiente. Spettroscopia coerente e tecniche

bidimensionali. Applicazioni sperimentali in laboratorio su sistemi molecolari. Relazione finale con discussione sulle esperienze di laboratorio.

### **Laboratorio di nanomateriali**

*E. Fratini*

Definizione di materiale nanostrutturato. Cenni alle proprietà e applicazioni di materiali nanostrutturati. Principali vie sintetiche per la produzione dei nanomateriali. Esempi di sintesi di nanoparticelle, nanowires, quantum dots, etc. Sistemi core/shell. Principali tecniche di caratterizzazione di nanomateriali (UV-vis., Fluorescenza, SAXS, XRD, TEM/SEM, etc.). In laboratorio: sintesi di nanoparticelle inorganiche di metalli nobili, ossidi e idrossidi metallici, ferrofluidi, fluo-dots e quantum dots green; sintesi di nanoparticelle polimeriche e assembly di cristalli colloidali.

### **Laboratorio di progettazione e sintesi organica**

*F. M. Cordero*

Corso teorico: concetti base ed esempi di organocatalisi enantioselettiva; ricerca bibliografica su banche dati on-line. Esperienza pratica: ad ogni studente verrà assegnato un progetto di sintesi su cui svolgere una ricerca bibliografica. In base alle informazioni trovate ed alle proprie conoscenze, lo studente dovrà elaborare un possibile piano di realizzazione del progetto assegnato, per poi presentarlo e discuterlo in aula. Il progetto sarà infine realizzato presso uno dei laboratori di ricerca del Dipartimento di Chimica.

### **Laboratorio di risonanze magnetiche**

*I. Felli*

Il corso si propone di fornire le basi per comprendere ed utilizzare le moderne tecniche spettroscopiche basate sulla risonanza magnetica nucleare combinando lezioni frontali ed esperienze in laboratorio. Dopo un'introduzione generale (gli spin nei campi magnetici, la strumentazione, le tecniche a impulsi in trasformata di Fourier, gli spettri monodimensionali, i gradienti di campo magnetico e la soppressione dell'intenso segnale del solvente), viene presentato il formalismo dell'operatore prodotto che permette di comprendere gran parte degli esperimenti multidimensionali sia omonucleari che eteronucleari. Infine, vengono introdotti i principi alla base dei fenomeni di rilassamento e presentati due metodi per ottenere informazioni strutturali e dinamiche a risoluzione atomica.

### **Laboratorio di sintesi delle sostanze organiche naturali**

*C. Nativi*

Metaboliti primari e secondari. Gli enzimi per la sintesi dei composti organici naturali. Biosintesi e sintesi organiche: similitudini e differenze. Le potenzialità delle sintesi organiche. Le reazioni di ossidazione e riduzione. Reazioni selettive: reazioni di condensazione e di epossidazione. Carboidrati e glicosidi. Reazioni di glicosidazione stereoselettiva. Esempi di sintesi di glicosidi naturali.

Studio delle esperienze che verranno svolte in laboratorio: 1) estrazione in corrente di vapore di sostanze naturali; 2) preparazione di nanoparticelle biocompatibili a partire da biopolimeri naturali; 3) sintesi di glicosidi immunoattivi

### **Magnetismo molecolare**

*R. Sessoli, L. Sorace*

Struttura elettronica degli ioni metallici. accoppiamento Russell-Saunders e j-j. Repulsione interelettronica e parametri di Racah. Richiamo di Teoria dei Gruppi e applicazione alla teoria del campo cristallino. Formalismo dell'hamiltoniano di spin. Principali classi di materiali magnetici molecolari. Principali interazioni: interazione di scambio e dipolare, anisotropia magnetica. Correlazioni magneto-strutturali. Tecniche di indagine: Introduzione con esercitazioni alla magnetometria ac e dc e risonanza paramagnetica elettronica con esercitazioni. Bistabilità ed isteresi in materiali molecolari e nanoscopici. Il processo di inversione della magnetizzazione. Effetti quantistici nella dinamica della magnetizzazione.

## **Materiali inorganici molecolari**

*A. Bencini*

Proprietà ottiche e di luminescenza di composti di coordinazione. Materiali funzionali basati su composti di coordinazione e loro uso (catalisi, sfruttamento dell'energia solare, memorizzazione di informazioni, diagnostica medica). Chemosensori ottici. Amplificazione del segnale luminoso ed effetto antenna. Materiali funzionalizzati per la determinazione di analiti in campo ambientale e biomedico. Proprietà magnetiche di materiali. Magnetici molecolari. Materiali ibridi organico-inorganici.

## **Metabolomica e proteomica strutturale nel drug discovery**

*C. Luchinat, P. Turano*

La pipeline del drug discovery in era post-genomica. Le fasi cliniche e la farmacogenomica. Brevettazione. Concetto di patologia target e target; target e pathway. I target classici; interazione fra due proteine come bersaglio. Target proteici e non proteici. Metodi di selezione del target. Definizione di farmaco. Agonisti e antagonisti. Curva dose-risposta. Definizione di costanti di binding e di dissociazione. Relazione con le costanti cinetiche. Inibitori suicidi. Cinetiche enzimatiche, schemi cinetici più complessi. Predizioni ADMET. Le 5 "regole del 5" di Lipinski. Drug design razionale e irrazionale. QSAR. Structure-based drug-design. Fragment-based drug-discovery. Considerazioni termodinamiche e guadagno entropico. Anchoring, merging, tethering. Drug-discovery in silico; struttura del target e programmi di docking. SAR by X-ray: soaking e cocristallizzazione. High-throughput screening (HTS) in vitro: fluorimetria, microcalorimetria, surface plasmon resonance. SAR by NMR. Screening con NMR: metodi protein-observed e ligand-observed.

La metabolomica: definizione, ruolo nella selezione del target e nella valutazione della risposta individuale al trattamento (precision medicine). Metodologie analitiche in metabolomica: spettrometria di massa e NMR; vantaggi e svantaggi di ciascun approccio. L'importanza della fase preanalitica. Metodi statistici per il trattamento dei dati: analisi multivariate e univariate. Il fenotipo metabolico individuale. Esempi di applicazioni della metabolomica in campo clinico.

## **Metodi di indagine strutturale in chimica organica**

*M. Cacciarini, C. Bello*

Il corso si propone di fornire le conoscenze teoriche e pratiche per la determinazione strutturale di molecole organiche di sintesi, carboidrati, piccoli peptidi e sostanze naturali mediante tecniche di spettroscopia NMR 1D e 2D, usando a complemento IR e tecniche avanzate di spettrometria di massa. Gli argomenti trattati comprenderanno i concetti generali utili per l'acquisizione, la elaborazione e la risoluzione degli spettri NMR di protone, di carbonio o di eteronuclei, e spettri NMR bidimensionali. Le lezioni saranno costituite da lezioni frontali, esercitazioni in aula e allo strumento o al computer.

## **Metodi matematici e statistici**

*R. Gianni*

Funzioni complesse fondamentali, le funzioni olomorfe, derivata complessa e sua rappresentazione, condizione di Cauchy-Riemann. Serie di potenze e funzioni olomorfe. Formula di rappresentazione delle funzioni olomorfe, il teorema dei residui. Spazi di Hilbert, le serie di Fourier e le loro proprietà, convergenza puntuale, in media aritmetica ed in norma  $L_2$  delle serie di Fourier. La trasformata di Fourier e le sue proprietà, formula di inversione, la trasformata di Fourier nello spazio  $L_2$ . Esercizi ed applicazioni.

## **Metodi sperimentali di indagine strutturale e dinamica**

*M. Pagliai*

Dinamica di sistemi molecolari. Funzioni di correlazione (classiche e quantistiche), rilassamento, defasamento e forme di riga. Risposta lineare. Matrice densità. Interazione del sistema molecolare con la radiazione: trattamento perturbativo. Rappresentazione diagrammatica. Suscettività lineare e non lineare. Spettroscopia non lineare. Spettroscopia risolta nel tempo e dinamica degli stati eccitati. Dinamica delle molecole in fase liquida. Aspetti sperimentali: laser e sorgenti coerenti; tecniche di misura. Spettroscopie coerenti di transizioni elettroniche e vibrazionali. Elementi di plasmonica. Spettroscopie intensificate su superfici metalliche nanostrutturate.

### **Metodi spettroscopici di indagine in chimica inorganica**

*L. Banci*

Il corso vuole fornire le conoscenze di base sulle tecniche spettroscopiche che permettono la caratterizzazione delle proprietà strutturali, dinamiche e funzionali di varie classi di molecole con particolare attenzione a quelle contenenti ioni metallici. Nel corso verrà analizzato lo spettro elettromagnetico e gli intervalli di energia delle varie tecniche spettroscopiche. Verranno presentati i principi di base delle spettroscopie di risonanza magnetica elettronica e nucleare e della spettroscopia elettronica e verranno dati cenni sulle spettroscopie a raggi X e Moessbauer. Il corso prevede lezioni in aula ed esercitazioni pratiche agli spettrometri e al computer.

### **Metodi strumentali in chimica analitica**

*I. Palchetti*

Valutazione statistica dei dati analitici. Validazione di nuovi metodi analitici. Il campionamento e preparazione del campione. Metodi elettroanalitici. Metodi separativi. Cromatografia. Elettroseparazioni. Tecniche immunochimiche. Sensori e Biosensori. Automazione, miniaturizzazione e semplificazione dei processi analitici. Teoria della miniaturizzazione. Microfabbricazione. Sistemi analitici miniaturizzati. Nuovi nanomateriali per applicazioni analitiche. Metodi automatici di analisi.

### **Metodologie analitiche innovative per l'energia sostenibile**

*M. Innocenti*

Analisi morfologiche e composizionali di superfici con tecniche Microscopiche e Spettroscopiche. Preparazione di superfici modificate per l'ottenimento di dispositivi di interesse tecnologico. Preparazione di superfici catalitiche ad alta reattività per la preparazione di celle a combustibile e celle solari di nuova generazione. Elettrodeposizione di leghe di interesse industriale a basso impatto ambientale con particolare attenzione all'industria Galvanica. Studio e prevenzione di fenomeni di corrosione. Tecniche innovative analitiche per la determinazione del colore, dello spessore, della resistenza alla corrosione di film sottili.

### **Metodologie chimico-fisiche per lo studio di nanosistemi**

*F. Ridi*

Proprietà dei sistemi alla nanoscala. Nanocompositi. Misura dell'area superficiale: BET, BJH, isoterme di adsorbimento. Microscopie: ottica, SEM, TEM, STM, AFM, crio-microscopie. Dynamic Light Scattering (DLS), potenziale Z. Spettroscopia UV, IR. Proprietà termiche dei nanosistemi e nanocompositi. Calorimetria. Termogravimetria. DSC modulata. Proprietà meccaniche di nanocompositi: nanoindentazione. Tecniche di indentazione a griglia.

### **Modellistica chimica e dinamica molecolare**

*G. Cardini*

Introduzione alla modellistica chimica. Note di Meccanica molecolare: forme funzionali semiempiriche, campi di forze. Simulazioni di insiemi molecolari. Dinamica Molecolare classica e insiemi termodinamici. Analisi delle traiettorie. Teoria del funzionale densità e sue applicazioni. Dinamica Molecolare ab-initio: Car-Parrinello.

### **Nanomateriali funzionali**

*M. Bonini*

Il corso è orientato a fornire allo studente conoscenze generali e specifiche sui materiali funzionali, la loro preparazione, le loro proprietà chimico-fisiche e le loro più recenti applicazioni nel campo della scienza dei materiali. In particolare, il corso si concentrerà sulle potenzialità dei materiali nanostrutturati ibridi organico-inorganici, in cui la combinazione di più componenti a livello nanometrico e molecolare porta a materiali con proprietà funzionali innovative. Saranno discussi i materiali bio-attivi per ingegneria tissutale, i materiali funzionali ottici e magnetici, polimeri conduttori e transistor ad effetto di campo, materiali per la conversione e l'immagazzinamento di energia, materiali compositi responsivi per applicazioni nel campo della sensoristica. Attraverso questi esempi, saranno analizzati in maniera approfondita gli aspetti legati alla progettazione, agli approcci sintetici, alle tecniche di caratterizzazione e all'applicazione di questi materiali.

## **NMR in Biologia strutturale**

*I. Felli*

La spettroscopia di risonanza magnetica nucleare (NMR) è oggi in grado di fornire informazioni strutturali e dinamiche a risoluzione atomica su complesse macromolecole biologiche in diversi stati di aggregazione rilevanti per capire il loro ruolo nei sistemi viventi.

Lo scopo del corso consiste nel fornire le basi delle moderne tecniche NMR per la caratterizzazione strutturale e dinamica di macromolecole biologiche e delle loro interazioni; verranno inoltre presentati i recenti sviluppi e discusse le prospettive.

## **Sensori e biosensori**

*G. Marrazza*

Definizione di Sensore e Biosensore. Tecniche di immobilizzazione di Enzimi, Anticorpi, Oligonucleotidi. Le tecniche elettrochimiche, ottiche e piezoelettriche di trasduzione. Applicazioni dei Biosensori per la Medicina (Glicemia, Pancreas e Rene artificiale), per l'Ambiente (Tossicità, Pesticidi, Erbicidi ecc.) e per il settore Alimentare (qualità degli alimenti, freschezza dei pesci, valutazione della presenza di OGM (Organismi Geneticamente Modificati)).

## **Sintesi e reattività dei complessi metallici**

*C. Giorgi*

Sintesi dei complessi di ioni metallici: aspetti termodinamici e cinetici. Sintesi metallo-assistite. Processi di self-assembling per la formazione di specie complesse organiche e inorganiche e loro uso nella realizzazione di nuovi materiali polifunzionali. Self-assembling in sistemi naturali. Sistemi catalitici e autoreplicanti. Applicazioni biochimiche e biomediche della chimica supramolecolare. Complessi di metalli di transizione come recettori per piccole molecole, quali ad esempio O<sub>2</sub> e NO, e loro applicazioni in campo biomedico. Tossicità degli ioni metallici. Terapia di chelazione. Complessi di ioni metallici, anche radioemettenti, come agenti terapeutici e diagnostici.

## **Sintesi industriali di composti organici**

*A. Salvini*

Sostenibilità e impatto ambientale dei processi chimici industriali. Fonti di materie prime, impianti e processi di separazione industriali, fonti energetiche. Sintesi da fonti rinnovabili e bioraffinerie. Applicazioni industriali di reazioni catalitiche e impatto ambientale. Le principali sintesi industriali di composti organici. Sintesi da CO e H<sub>2</sub>: Reazioni di idroformilazione e carbonilazione. Ossidazione idrocarburi alifatici e aromatici: Ossidazione di alcani; alcheni; nafteni; Alcoli per idratazione delle olefine.

## **Solidi molecolari: struttura, dinamica e spettroscopie ottiche e NMR**

*R. Chelli, E. Ravera*

Classificazione dei solidi. Solidi amorfi e cristallini. Energia di coesione. Struttura elettronica dei solidi. Metalli. Semiconduttori. Metodi computazionali per lo studio di sistemi allo stato solido. Applicazioni di spettroscopia ottica. Proprietà elettriche, elastiche e magnetiche dei solidi. Interazioni degli spin nucleari. Interazione di Zeeman. Impulsi di radiofrequenze. Carbon-detection. Rilassamento in presenza di modulazioni coerenti. Paramagnetismo. Esperimenti multidimensionali. Sequenze di impulsi. Applicazioni a sistemi biologici e alla scienza dei materiali. Esercitazioni: Preparazione di campioni solidi e magic angle spinning; Impostazione di esperimenti; Analisi dati.

## **Spettroscopia molecolare**

*R. Bini*

Teoria del corpo nero. Natura della radiazione elettromagnetica e sua interazione con la materia. Teoria delle perturbazioni dipendente dal tempo. Assorbimento ed emissione, regole selezione, regola d'oro di Fermi. Forme di riga. Spettroscopia dipendente dal tempo: funzione di correlazione temporale, spettroscopia FIR e Raman depolarizzato di liquidi. Spettroscopia vibrazionale e rotazionale di molecole diatomiche. Rotazioni di molecole poliatomiche. Vibrazioni di molecole poliatomiche: approccio classico e quantomeccanico. Spettri vibrazionali di cristalli molecolari, proprietà di simmetria e diagrammi di correlazione. Spettroscopia elettronica di molecole diatomiche: struttura vibrazionale e principio di Franck-Condon, emissione,

dissociazione. Spettroscopia elettronica di molecole poliatomiche, limite di validità dell'approssimazione di Born-Oppenheimer e struttura vibronica. Cromofori. Effetto del solvente. Stati elettronici in spettroscopia ed in fotochimica. La spettroscopia Raman: approccio classico e relazione di Kramers-Heisenberg-Dirac. Raman risonante. Polarizzazione in Raman. Processi ottici non-lineari: assorbimenti a due e più fotoni, Raman stimolato, tecniche Raman coerenti. L'attività di laboratorio riguarda esercitazioni di tipo avanzato dove gli studenti affrontano le problematiche della ricerca scientifica in questo ambito disciplinare.

## **Stereochimica**

### *E. Occhiato*

Il corso si propone di ampliare le conoscenze di stereochimica organica acquisite nei corsi del ciclo precedente e viene curata l'acquisizione di un linguaggio stereochimico corretto. Lo studente acquisirà la capacità di riconoscere gli elementi di chiralità presenti in una molecola e di attribuirne la configurazione. Saranno affrontate le metodiche impiegate negli studi stereochimici e lo studente sarà in grado di scegliere i metodi più adatti per la determinazione della composizione enantiomerica di un composto chirale (polarimetria, cromatografia, NMR), la separazione degli enantiomeri (cristallizzazione, formazione di diastereoisomeri, metodi cromatografici, risoluzioni cinetiche), la determinazione della configurazione relativa (NMR) e di quella assoluta (NMR, CD, RX). Il corso fornisce anche le conoscenze necessarie per comprendere gli effetti conformazionali, sterici e stereoelettronici sulle reazioni organiche.

Alla fine del corso l'esame di casi studio ed esercitazioni in aula verteranno su analisi conformazionali e configurazionali attraverso indagini spettroscopiche NMR (tecniche mono e bi-dimensionali, esperimenti a T variabile, ecc).

## **Stereoselettività in sintesi organica**

### *A. Goti*

Applicazioni delle reazioni organiche in sintesi stereoselettive ed asimmetriche. Composti organometallici polari. Derivati di organolitio ed organomagnesio. Proprietà, preparazione, reattività ed utilizzo in sintesi organiche.

Stereoselettività dell'addizione di nucleofili a composti carbonilici aciclici e ciclici. Modelli di stato di transizione. Composti organometallici covalenti. Derivati di organoboro, organosilicio ed organostagno. Proprietà, preparazione ed utilizzo in sintesi. Reazioni di allilazione. Stereoselettività dell'addizione di allil- e crotil- metalli di tipo I, II e III a composti carbonilici. Modelli di stato di transizione ciclico ed aperto. Enantioselettività, diastereoselettività semplice ed assoluta: doppia induzione asimmetrica. Chimica degli enoli ed enolati. Metallo enolati e loro generazione: stereoselettività E(O)/Z(O). Alchilazione di enolati. C-Alchilazione vs O-alchilazione. Alchilazione enantioselettiva di aldeidi, chetoni e derivati di acidi carbossilici. Reazione aldolica diretta di derivati carbonilici e carbossilici: regio-, diastereo-, enantioselettività. Diastereoselettività semplice: modelli di stato di transizione ciclico ed aperto. Stereoselettività assoluta. Singola e doppia induzione asimmetrica.

## **Storia della Chimica e della Fisica**

### *R. Livi, P. Lo Nostro, E. Bougleux*

Il corso si propone di fornire agli studenti un percorso che mira a ricostruire in una prospettiva storica le principali tappe di sviluppo delle moderne scienze fisiche e chimiche con particolare al periodo che va dal XVIII secolo fino a quello a cavallo tra le due guerre mondiali del XX secolo. Un tale percorso viene offerto agli studenti dei corsi di studio di Fisica e Chimica in ragione dei profondi legami e affinità culturali e concettuali che hanno caratterizzato il percorso storico di queste due discipline scientifiche.

Il programma del corso è suddiviso in tre moduli di 2 crediti ciascuno.

Nel primo modulo si tratteranno i temi seguenti: sviluppo dei concetti di energia e rendimento in concomitanza della prima rivoluzione industriale; affermazione della teoria cinetica e dei concetti di etere calorico ed elettromagnetico; energetismo e atomismo; nascita della meccanica statistica e della teoria dei quanti; la Big Science e gli sviluppi della fisica nucleare.

Nel secondo modulo affronta due specifici casi di studio. Il meccanicismo tra Mach e Boltzmann; reversibilità ed entropia. Simultaneità e durata tra Poincaré e Bergson. Relatività dei sistemi di riferimento. Genesi della relatività ristretta: Lorenz, Poincaré, Einstein. I lavori einsteiniani del 1905. Genesi della relatività generale. Dibattito tra Einstein e Hilbert. Storia della rivelazione delle onde gravitazionali. Rapporti tra scienza ed

economia nel secolo XIX. Diffusione delle scienze nell'impero coloniale inglese. La classificazione e la tassonomia come strumenti di egemonia. Elettricità, magnetismo, esperimenti sul vuoto e sulla luce, al British Museum e nel contesto coloniale (inizio secolo XX).

Il terzo modulo comprende i seguenti argomenti: finalità e metodologie della Chimica dall'antichità fino agli inizi del XX secolo, con particolare riguardo alle problematiche sviluppate dal XV secolo in poi. Le teorie del calorico e del flogisto. La *vis vitalis* e la nascita della Chimica organica. Gli elementi: classificazione e scoperte, dalla teoria dei 4 elementi fino all'elaborazione delle Tavole Periodiche. Sviluppi e intersezioni della Termodinamica con le altre discipline. Approfondimenti di alcuni studi pionieristici in ambito chimico. L'acqua nella Storia della Scienza.

### **Struttura e reattività di metalloproteine**

*R. Pierattelli*

Il Corso presenta la chimica delle molecole biologiche contenenti ioni metallici inserendole nella ricerca genomica. Inizia con una panoramica sui modi di controllo e uso degli ioni metallici nei processi biologici e arriva alla descrizione della funzione e della reattività di alcune classi di molecole nella cornice della biologia dei sistemi. Nel corso vengono anche presentati alcuni metodi di investigazione di metalloproteine.

### **Struttura elettronica e proprietà molecolari**

*M. Piccioli, F. Totti*

Struttura elettronica e legame chimico. Crystal field. Controllo elettronico della configurazione nucleare: vibrazioni e accoppiamento vibronico. Orbitale Molecolare e suo approccio perturbativo per lo studio delle proprietà elettroniche dei metalli di transizione. Analogia isolobale. Magnetismo: derivazione equazione Van Vleck, legge di Curie(-Weiss), super-scambio, anisotropia magnetica. Metodi d'indagine per lo studio della struttura elettronica: Uv-visibile (luce polarizzata) e suscettività magnetica. Hamiltoniano di Zeeman, interazione iperfine. Spettroscopia NMR applicata allo studio di composti di coordinazione, metalloproteine e altri sistemi contenenti ioni metallici e sistemi magneticamente accoppiati. Costante di accoppiamento iperfine, meccanismi di spin delocalizzazione e polarizzazione. Anisotropia magnetica e sue conseguenze nell'interazione iperfine. Suscettività magnetica, esperimento di Evans. Meccanismi di rilassamento elettronico e nucleare. Tempi di correlazione elettronica, ioni metallici e numero di coordinazione. Sistemi magneticamente accoppiati. Aspetti sperimentali e pratici della spettroscopia NMR di sistemi paramagnetici.

### **Strutturistica chimica**

*C. Bazzicalupi*

L'insegnamento fornisce le definizioni di base di stato cristallino e delle leggi che lo regolano e delle tecniche sperimentali che ne consentono lo studio con particolare riguardo alla diffrazione a raggi X su cristallo singolo (cenni di diffrazione da campioni microcristallini e di diffrazione neutronica). Aspetti teorici saranno analizzati introducendo il teorema di Bloch e le sue implicazioni. Sarà trattato in particolare il fenomeno del polimorfismo dei cristalli molecolari. Saranno svolte esercitazioni mirate sulle strumentazioni del Centro Interdipartimentale di Cristallografia Strutturale e sulle principali banche dati cristallografiche.

### **Tecnologia di materiali avanzati**

*U. Bardi*

Proprietà dei sistemi complessi: transizioni di fase. Teoria delle catastrofi, effetti dinamici nei sistemi. Proprietà dinamiche dei materiali: deformazione elastica e anelastica, frattura e altri fenomeni non lineari nei materiali. Teoria di Bak della criticalità auto-organizzata, applicazione ai materiali solidi e agli ecosistemi. Simulazioni dinamiche mediante software VENSIM. Simulazioni dinamiche di sistemi ad agenti. Simulazioni di sistemi evolutivisti. Applicazioni di laboratorio; esercizi di osservazione e di interpretazione del comportamento dei sistemi complessi. Applicazione al sistema climatico terrestre.

### **Valorizzazione industriale dei rifiuti**

*L. Rosi*

Il corso proposto affronta, parzialmente, alcune tematiche tipiche degli insegnamenti dei corsi di ingegneria sanitaria ambientale, ma con un taglio esclusivamente di natura Chimica. In tale ambito, dopo classificazione dei rifiuti secondo la normativa vigente e la discussione dei principi alla base della cosiddetta "Economia

circolare" (con riferimento alle direttive europee), il corso prende specificatamente in esame la valorizzazione attraverso i trattamenti ad oggi in essere, dei rifiuti costituiti da materie plastiche. Gli impianti sono accennati mentre si approfondiscono le reazioni chimiche coinvolte nei processi di trattamento discussi. Conclude il corso la presentazione di un case study: pirolisi per la produzione di fuel da pneumatici fuori uso/processo integrati di bioraffineria.