

2010

## C. Organica

1

**Prof. S. Chimichi** (x studenti del II o III anno della Scuola)

### **Spettroscopia NMR: aspetti teorici e pratici delle moderne tecniche bidimensionali di correlazione scalare.**

Descrizione: esame delle principali tecniche 2D NMR basate su correlazioni mo- eteronucleari di tipo scalare (HH-COSY ed esperimenti correlati, HSQC, HMQC, H2BC). I cammini di trasferimento delle coerenze. Selezione delle coerenze mediante cicli di fase e/o impiego dei gradienti di campo magnetico. Esercitazione sull'impiego dei gradienti.

2

**Prof. Donatella Giomi**

### **Organocatalisi asimmetrica: un nuovo tipo di catalisi in condizioni metal-free**

L'impiego di piccole molecole organiche quali catalizzatori in sintesi asimmetrica metal-free ha raggiunto oggi un notevole sviluppo sia grazie alla notevole efficienza in termini preparativi che ai numerosi vantaggi di tipo economico ed ambientale connessi all'assenza di metalli.

In tale contesto verranno esaminate applicazioni sintetiche di tipo diverso (ad es. reazioni di cicloaddizione, condensazione aldolica, amminazione di aldeidi, reazioni di Michael, reazioni di Mannich, ecc.), con particolare attenzione ai processi riduttivi biomimetici mediati da diidropiridine e alla sintesi totale di prodotti naturali e/o interessanti sotto il profilo biologico e farmacologico. In molti casi, i processi organocatalizzati permettono la sintesi dei prodotti di reazione con alte rese e con una purezza ottica quasi completa. Verranno opportunamente presentati le potenzialità e i limiti di questa nuova metodologia.

3

**Prof. Antonio Guarna**

### **Stereochimica: dai principi di base alle nuove metodologie**

Principi di base (4 ore)

Metodologie per la determinazione della configurazione assoluta e per l'analisi conformazionale (4 ore)

4

**Alessandro Mordini (ICCOM-CNR), Alfredo Paio (GSK – Verona), Enzo Perrotta (ChemPer, Firenze)  
(possibilmente Sett.2010)**

### **Nuove tecniche nel campo della chimica organica ecocompatibile**

Il corso affronterà un'analisi esauriente di quelle tecniche nuove che sono a disposizione del chimico organico di sintesi per sviluppare nuove metodologie ecocompatibili.

Si tratteranno l'uso delle microonde come metodo moderno ed efficiente per attivare le reazioni organiche. Verranno trattati i principi generali che saranno poi illustrati con vari esempi.

Si illustreranno aspetti della sintesi su fase solida; l'uso di reagenti supportati e scavenger in reazioni organiche e l'utilizzazione di micro reattori.

Tutti gli argomenti trattati, grazie alla partecipazione del Dr. Paio della GSK e del Dr. Perrotta della Chemper, saranno ampiamente illustrati da esempi applicativi

Mordini	ore 3
Paio	ore 2
Perrotta	ore 3

**Alessandro Mordini, Gianna Reginato e Maurizio Peruzzini (ICCOM – CNR)  
(possibilmente Sett.2010)**

### **Chimica organometallica sostenibile**

Il corso tratterà tutti i più moderni aspetti della chimica organometallica con particolare riguardo ai temi più attuali quali la selettività e l'efficienza dei processi organometallici e la loro applicazione in campo industriale.

Si approfondiranno i temi della chemo-, regio- e stereo selettività in reazioni con i metalli dei gruppi principali illustrando ad esempio i più moderni aspetti delle reazioni di metallazione regio selettiva di sistemi aromatici ed etero aromatici e le reazioni enantioselettive con reagenti di organo litio.

Si illustreranno tutti i più recenti metodi di coupling catalizzati da metalli di transizione con riguardo agli aspetti di efficienza ed eco compatibilità e analizzando per ognuno di essi vantaggi e svantaggi. Infine si tratteranno i più moderni aspetti delle reazioni di idrogenazione e di produzione di idrogeno tramite catalisi con complessi di metalli di transizione.

Mordini	ore 2
Reginato	ore 3
Peruzzini	ore 3

## **C. Analitica**

**1**

**Dr. Maria Minunni**

### **Immobilizzazione di biomolecole su superfici e realizzazione di dispositivi analitici innovativi**

Le lezioni riguarderanno i metodi di immobilizzazione di biomolecole su superficie elettrodiche (grafite, oro, ecc.) per la realizzazione di sensori. In particolare saranno introdotti i concetti di sensore e biosensore chimico, i vari principi di trasduzione: elettrochimico, ottico e piezoelettrico. Le molecole che sono d'interesse per la realizzazione di questi dispositivi (enzimi, anticorpi, acidi nucleici). Una volta descritti i sistemi, si passerà a studiare i vari approcci utilizzati per immobilizzare le molecole sulle superfici: adsorbimento fisico o intrappolamento in polimeri (i.e. elettropolimerizzazione), legame covalente e quindi modifica della superficie utilizzando diverse chimiche (utilizzo dei tioli per superfici d'oro); vantaggi e svantaggi dei vari approcci. Going to nano: utilizzo di nanoparticelle e nanotubi in sensoristica; Esempi di superficie modificate e applicazione alla chimica analitica. Realizzazione di immunosensori, sensori a DNA, aptasensori.

**2**

**Prof. Roberto Udisti**

### **Processi di feedback clima-ambiente. Il riscaldamento globale**

L'effetto dei gas serra e degli aerosol sul clima. Le attuali risposte ambientali alle variazioni climatiche. Variazioni dell'estensione delle aree glaciali, del ciclo idrogeologico globale, del livello del mare e dei sistemi di circolazione atmosferica e oceanica. Interpretazione delle variazioni climatiche come conseguenza di cicli naturali e di emissioni antropiche. Paleo-clima e paleo-ambiente. La ricostruzione delle relazioni clima-ambiente per l'ultimo milione di anni dall'analisi chimica, fisica e isotopica di carote di ghiaccio perforate in aree polari. Effetti sul clima delle deposizioni di polveri sulle superfici oceaniche, l'attività fitoplanctonica, l'estensione del ghiaccio marino e l'uptake di anidride carbonica dall'atmosfera. I cicli climatici glaciale-interglaciale. Ricostruzione della storia delle eruzioni vulcaniche nel passato e loro correlazione con il clima. Ricostruzioni climatiche e ambientali dall'analisi chimica di

sedimenti marini e di laghi sub-glaciali. Tecniche analitiche innovative per la misura di marker climatici ed ambientali in ambienti estremi (laghi sub-glaciali e piattaforme di ghiaccio).

Docenti:

Roberto Udisti (4 ore)

Rita Traversi (2 ore)

Silvia Becagli (2 ore)

## C. Inorganica

1

### **Prof. Roberta Sessoli, Dott. Claudio Sangregorio** **Materiali Magnetici Nanostrutturati e Molecolari**

Il corso ripercorrerà brevemente i fondamenti del magnetismo e delle tecniche di indagine magnetiche, proponendo anche una esercitazione pratica. Successivamente si focalizzerà sulle proprietà derivanti dal confinamento del materiale alla scala nanometrica. Verranno affrontati gli aspetti relativi alla sintesi ed alla caratterizzazione di nanoparticelle magnetiche e di cluster molecolari e sarà offerta una panoramica sulle loro applicazioni.

## C. Fisica

1

### **Dr. Giovanni Aloisi**

#### **Le microscopie a scansione di sonda**

- 1) Il premio Nobel nel 1986 per la tecnica STM
- 2) Sviluppo dello STM e delle sue varianti
- 3) Tecnica AFM
- 4) Tecnica SNOM
- 5) La misura SPM: requisiti meccanici ed elettronici per alta risoluzione.
- 6) Preparazione campioni
- 7) Elaborazione dati
- 8) Esercitazione pratica

2

### **Prof. Rolando Guidelli**

#### **Trasporto ionico attraverso le biomembrane**

##### **I parte (Febbraio) : i canali ionici**

Fornisce le basi del trasporto ionico attraverso le membrane biologiche e quelle biomimetiche da parte dei canali ionici. Concetti di campo elettrico, potenziale elettrico e costante dielettrica: profilo del potenziale elettrico attraverso una membrana (potenziale transmembranario). In base al concetto di potenziale elettrochimico, sarà descritto il potenziale di equilibrio attraverso una membrana contenente un canale ione-selettivo e il potenziale di riposo attraverso una membrana contenente più canali ionici. Si considererà la probabilità di apertura di un canale ionico e la sequenza che porta alla trasmissione degli impulsi nervosi (potenziale di azione). Sarà considerata la relazione struttura-funzione dei canali del sodio e del potassio. Si descriveranno le proprietà delle membrane biomimetiche utilizzate per lo studio della funzione dei canali ionici.

3

##### **II parte (Giugno o anno successivo) : le pompe ioniche**

Fornisce le basi del trasporto ionico attraverso le membrane biologiche e quelle biomimetiche da parte delle pompe ioniche. Saranno illustrate le basi della termodinamica dei processi irreversibili

per comprendere l'accoppiamento di un processo scalare e di un vettoriale, che sono alla base del funzionamento delle pompe ioniche. Trasporto attivo primario e secondario. Batteriorodopsina e pompe ATP-asiche. Disaccoppiamento intrinseco. Livelli di energia degli stati del ciclo enzimatico delle pompe. Elettrogeneticità delle pompe ioniche e loro studio con l'impiego di membrane biomimetiche. Ciclo enzimatico della Na,K-ATPasi e della Ca-ATPasi del reticolo sarcoplasmatico.

4

**Dr. Pierandrea Lo Nostro**  
**Chimica Fisica Ambientale**

Composizione e struttura dell'atmosfera. Gradiente adiabatico dell'atmosfera. Bilancio energetico. Modi di redistribuzione dell'energia. Radiazione di corpo nero, equilibrio radiativo. Calcolo della temperatura della Terra. Principi base dell'effetto serra. Ozono stratosferico e ciclo di Chapman. Dinamica dell'atmosfera: gradiente di pressione, forze di attrito, accelerazione di Coriolis. Flusso ciclostrofico e geostrofico. Advezione in atmosfera. La dinamica delle correnti oceaniche, spirale di Ekman, il nastro trasportatore. Proprietà di trasporto.

5

**Prof. Lino Neto**  
**Introduzione ai tensori e loro applicazioni**

Spazio diretto a spazio reciproco in un sistema planare obliquo. Applicazione al reticolo di un sistema monoclinico. Collegamento con le formule di diffrazione di Raggi X e con le rappresentazioni irriducibili dei gruppi spaziali. Trasformazione di coordinate e vettori base passando da un sistema cartesiano ad uno obliquo. Vettore come tensore di primo ordine. Componenti controvarianti e covarianti. Esempi. Matrice Jacobiana e metrica, definizione di tensore metrico. Spazi curvi, esempio nel caso delle coordinate sferiche, loro uso per l'Hamiltoniano quantomeccanico per l'atomo di idrogeno. Derivazione delle equazioni di Lagrange ed Hamilton partendo dalle equazione del moto di Newton. Accelerazioni generalizzate, velocità momenti coniugati.

**C. Fisica/ C. Inorganica**

**Prof M.Romanelli, Dr. F. Di Benedetto**

**Risonanza Paramagnetica Elettronica in stato solido: corso in tre anni**

**I anno** : 3 CFU (8 ore)

Richiami di M. Q.; i momenti angolari orbitale e di spin dell'elettrone.

Effetto Zeeman e condizione di risonanza.

Forma e larghezza di riga

Accoppiamento spin-orbita

Le interazioni magnetiche: tensori Zeeman, iperfine e fine.

Ioni di metalli di transizione

Radicali

Strumentazione EPR ed interpretazione di spettri

**Corsi proposti di altri settori**

**Prof. Marco Ruggiero (BIO/11)**  
**Le basi chimiche dell'AIDS**

La definizione di AIDS. L'epidemiologia di AIDS in Italia ed i paragoni con il resto del mondo. Cenni di fisiopatologia del sistema immunitario e delle sue deficienze. I co-fattori chimici alla base dell'immunodeficienza. Il ruolo del virus HIV. Il ruolo degli stupefacenti. Il ruolo degli afrodisiaci. Il ruolo degli eccipienti utilizzati nelle "droghe da strada". Il ruolo dei farmaci antiretrovirali. Gli effetti collaterali dei farmaci antiretrovirali.

**Prof. Gabriele Spina (FIS/03)**  
**Spazi di Liouville in spettroscopia**

Il corso richiede conoscenze di meccanica quantistica sia teoriche che di uso

Programma di massima:

- 1) Presentazione del formalismo matematico (circa 2 ore)
- 2) Applicazioni in spettroscopia atomica (circa 2 ore)
- 3) Applicazioni in spettroscopia nucleare (circa 2 ore)
- 4) Applicazioni in NMR (circa 2 ore)

2011

## C. Inorganica

1

**Prof. Luigi Messori**

### **Metalli in Medicina: Complessi metallici come agenti antitumorali**

Il corso vuole fornire le informazioni di base ma anche gli ultimi aggiornamenti riguardo all'impiego dei complessi metallici nel trattamento dei tumori, ponendo l'accento sugli aspetti bioinorganici e meccanicistici. L'importanza di questo settore di ricerca è strettamente legata al grande successo clinico dei composti del platino. Il corso considererà con particolare attenzione l'interpretazione corrente del meccanismo dell'azione biologica dei composti del platino; si cercherà di mostrare come l'informazione meccanicistica finora ottenuta possa risultare utile per la progettazione di nuovi farmaci. Verranno poi analizzate in grande dettaglio le potenzialità e le specificità di altre famiglie di complessi metallici come potenziali farmaci anticancro.

1. Introduzione del problema. il caso del cisplatino
2. Il cisplatino ed i nuovi platini
3. Oltre il platino: rutenio ed altre famiglie di composti metallici
4. Il caso dell'oro

2

**Dr. Carla Bazzicalupi**

### **Indagine strutturale tramite diffrazione a raggi X: principi ed applicazioni**

Il corso è pensato allo scopo di fornire agli studenti le informazioni necessarie alla comprensione ed all'interpretazione del dato strutturale ottenuto principalmente tramite strumentazioni di laboratorio. A tale scopo oltre ad una esposizione dei concetti fondamentali propri della tecnica saranno illustrati alcuni esempi di strutture cristalline risolte ed analizzate. Saranno anche affrontati gli aspetti relativi all'investigazione di alcune banche dati cristallografiche, con particolare riferimento al Cambridge Structural Database per composti organici e metallorganici.

## C. Fisica/ C. Inorganica

**Dr. L. Sorace, Dr. F. Di Benedetto;**

### **Risonanza Paramagnetica Elettronica in stato solido: corso in tre anni**

**II anno:** 3 CFU (8 ore)

Campo cristallino e simmetria: spettri di monocristallo

Spettri di sistemi disordinati (polveri, vetri)

Hamiltoniano di spin

EPR ad alto campo

ENDOR

## C. Fisica

1

**Dr. Riccardo Chelli**

### **Panorami statistici per il calcolo dell'energia libera**

Concetti fondamentali di meccanica statistica, legge di distribuzione di Maxwell-Boltzmann, funzione di partizione, grandezze termodinamiche e funzione di partizione, definizione statistica di energia libera, potenziale di forza media, metodi stocastici per il campionamento canonico (simulazioni Monte Carlo), metodi di equilibrio per il calcolo dell'energia libera (integrazione

termodinamica e metodo delle perturbazioni dell'energia libera), metodi di non-equilibrio per il calcolo dell'energia libera (teoremi di fluttuazione, uguaglianza di Jarzynski), derivazione statistica del secondo principio della termodinamica. Esempio: calcolo della differenza di energia libera di solvatazione di metano e acqua.

2

**Dr. Pierandrea Lo Nostro**  
**Effetto dello Ione Specifico**

Soluzioni acquose di sali. La specificità chimica. I parametri (carica, dimensioni, polarizzabilità potenziale di ionizzazione). Tipi di interazioni coinvolte. Forze elettrostatiche e forze di dispersione. Il problema del solvente acqua. Idratazione. Coppie ioniche. Trasferimento di carica. Teoria limite di Debye-Huckel. Effetti specifici in fase bulk: coefficiente di attività, viscosità, calore specifico isobaro, proprietà colligative, costante di Setschenow, pH. Effetti specifici alle interfasi: self-assembly, adsorbimento alle interfasi, coalescenza delle bolle, film sottili. Effetti specifici in sistemi biologici. Effetto dei sali in solventi non acquosi.

3

**Dr. Maurizio Muniz**  
**Caratterizzazione di Materiali mediante Spettroscopia Raman**

Il programma riguarda le caratteristiche generali della Spettroscopia Raman e le sue limitazioni, insieme a quelle della spettroscopia di Risonanza Raman e SERS, con annessi esempi illustrativi nell'ambito della caratterizzazione di Materiali.

**Chimica Organica**

1

**Maurizio Peruzzini , Alessandro Mordini , Gianna Reginato**  
**Chimica ed energia: la sfida delle nuove tecnologie per una gestione sostenibile del problema energia**

Argomenti inerenti il problema dell'energia. Il problema sarà inizialmente affrontato facendo il punto sul bilancio energetico del pianeta e metterà in evidenza come il prossimo imminente *shortage* di fonti fossili renda necessario lo sviluppo di una serie di tecnologie che si caratterizzano per una spiccata sostenibilità e per il ricorso sempre più massiccio alle energie rinnovabili (solare, eolico, biomasse etc) e a vettori energetici alternativi a quelli prodotti dai combustibili fossili (etanolo, metanolo, idrogeno).

Temi che saranno affrontati riguarderanno la definizione e la presentazione dei concetti di sostenibilità e sviluppo sostenibile sia da un punto di vista chimico che più propriamente energetico a cui faranno seguito l'illustrazione di esempi specifici con stretto riferimento ai grandi problemi della riduzione delle scorte di materiali strategici, primi fra tutti, ma non unicamente le fonti di carbonio fossile, ai problemi connessi con l'emissione di carbonio antropico nell'atmosfera e così via.

Un modulo ampio sarà dedicato allo sviluppo delle tecnologie legate ad una possibile transizione verso quella che si conviene chiamare "economia dell'idrogeno" in cui verranno illustrati vantaggi e colli di bottiglia dell'impiego generalizzato di questo vettore energetico con indicazioni precise sulla sua produzione, immagazzinamento ed utilizzazione mediante celle a combustibile. Un secondo modulo sarà dedicato ai biocombustibili e alla loro produzione sostenibile da risorse rinnovabili con enfasi posta non solo sul bioetanolo e sul biodiesel, ma anche sui problemi a latere

di tale produzione (problemi geopolitici per la competizione con la catena alimentare, problema del glicerolo etc).

Un terzo modulo vertera' sullo sviluppo di nuovi materiali per la conversione di energia solare in energia elettrica (sistemi fotovoltaici, celle di Graetzel, elettronica di plastica etc) collegando l'argomento anche al problema dello splitting fotochimico dell'acqua e a quello della fotosintesi artificiale.

Nel corso saranno quindi introdotti argomenti che spaziano dalla chimica inorganica a quella analitica, dalla chimica organica alla macroeconomia ambientale etc.

Peruzzini ore 2

Mordini ore 3

Reginato ore 3

**2012**

**C. Fisica/ C. Inorganica**

**Prof. M. Romanelli, Dr. M. Fittipaldi**

**Risonanza Paramagnetica Elettronica in stato solido: corso in tre anni**

**III anno:** 3 CFU (8 ore)

EPR pulsato

La matrice densità

La magnetizzazione nelle sequenze di impulsi: echi di spin

ESEEM

EPR risolta nel tempo