



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DI TORINO

010078

BROCHURE DEI CORSI



Laurea Magistrale in Chimica



Indice

Indice	1
BIOCHIMICA STRUTTURALE E FUNZIONALE	3
Functional and Structural Biochemistry	
CATALISI	8
Catalysis	
CHEMIOMETRIA	13
CHEMOMETRICS	
CHIMICA AGRARIA	18
AGRICULTURAL CHEMISTRY	
CHIMICA BIOINORGANICA	22
Bioinorganic chemistry	
CHIMICA COMPUTAZIONALE	26
COMPUTATIONAL CHEMISTRY	
CHIMICA DELLO STATO SOLIDO	31
SOLID STATE CHEMISTRY	
COMPLESSI METALLICI (PER LA MEDICINA, AMBIENTE, ENERGIA)	34
Metal complexes (medicine, environment, energy)	
ELETTROCHIMICA	38
Applied Electrocatalsis	
IDENTIFICAZIONE DI COMPOSTI ORGANICI	43
Identification of organic compounds	
MATERIALI POLIMERICI	47
Polymeric Materials	
METODOLOGIE DI SINTESI E SVILUPPO FARMACEUTICO	51
Synthesis and Development Methodologies	
MODELLISTICA DEI SOLIDI	56
SOLID STATE MODELING AND SIMULATION	
MODELLISTICA MOLECOLARE	61
MOLECULAR MODELLING	
NUOVI ORIENTAMENTI IN SINTESI ORGANICA	67
New Trends in Organic Chemistry	
PROGETTAZIONE EUROPEA, DIRITTO DELL'INNOVAZIONE E DELLA PROPRIETÀ INTELLETTUALE	70
EUROPEAN PROJECTS, INNOVATION AND INTELLECTUAL PROPERTY LAW	
RADIOCHIMICA	74
RADIOCHEMISTRY	
RISONANZE MAGNETICHE	77
Magnetic Resonance	
SINTESI E MECCANISMI IN CHIMICA ORGANICA	80
Synthesis and mechanisms in organic chemistry	
SINTESI INORGANICHE	86
Inorganic Synthesis	
STRATEGIE ANALITICHE	89
ANALYTICAL STRATEGIES	
STRUTTURISTICA	93
Structural Chemistry	

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	
Docenti:	
Contatti docente:	
Anno:	
Tipologia:	
Crediti/Valenza:	
SSD attività didattica:	
Erogazione:	
Lingua:	
Frequenza:	
Tipologia esame:	

Pagina web del corso: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?_id=ff06

BIOCHIMICA STRUTTURALE E FUNZIONALE

Functional and Structural Biochemistry

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	CHI0047
Docenti:	Prof. Sheila Sadeghi (Titolare del corso) Dott. Giovanna Di Nardo (Titolare del corso)
Contatti docente:	0116704528, sheila.sadeghi@unito.it
Anno:	1° anno
Tipologia:	Caratterizzante
Crediti/Valenza:	6
SSD attività didattica:	BIO/10 - biochimica
Erogazione:	Tradizionale
Lingua:	Inglese
Frequenza:	Facoltativa
Tipologia esame:	Scritto

PREREQUISITI

Italiano

Conoscenze di base di chimica biologica Conoscenze di tecniche di separazione e analisi di biomolecole

English

Basic knowledge of biological chemistry Knowledge of techniques for the separation and analysis of biomolecules

OBIETTIVI FORMATIVI

Italiano

L'insegnamento concorre alla realizzazione degli obiettivi formativi del Corso di Laurea Magistrale in Chimica ponendo l'attenzione sulle macromolecole in termini di caratterizzazione strutturale e attività biologica per l'utilizzo finale in campi come la salute e la green chemistry.

In particolare, il corso fornisce allo studente conoscenze dettagliate su:

- relazione struttura-funzione delle macromolecole biologiche
- studio del folding delle proteine
- evoluzione di strutture proteiche e di moduli proteici
- metodi spettroscopici per lo studio della struttura delle proteine
- cristallografia ai raggi X
- analisi e costruzione di modelli molecolari di strutture proteiche
- Attivazione di ossigeno molecolare da cofattori presenti nelle proteine
- analisi di struttura-funzione applicata a emo-proteine, flavo-proteine e rame-proteine.

Nelle esercitazioni di laboratorio lo studente imparerà a generare modelli di strutture proteiche con approcci bioinformatici e utilizzerà metodi sperimentali di cristallizzazione delle proteine.

English

The course contributes to the objectives of the Master Degree Course in Chemistry, focusing on macromolecules in terms of structural characterization and biological activity for end use in fields such as health and green chemistry.

In particular, the course provides the student with detailed knowledge of:

- Structure-function relationships of biological macromolecules
- protein folding
- Evolution of protein structures and protein modules
- Spectroscopic techniques applied to the study of protein structure
- X-ray crystallography applied to proteins
- Analysis and construction of molecular models of protein structures
- Activation of molecular oxygen by cofactors found in proteins.
- Analysis of structure-function applied to haem-, flavo-proteins and copper proteins.

In the practicals, the student will learn to create models of protein structures through bioinformatic approaches and will use experimental methods for protein crystallization

RISULTATI DELL'APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano

CONOSCENZA E COMPRESIONE

Al termine dell'insegnamento lo studente comprenderà:

- le differenze tra elementi di struttura primaria, secondaria e terziaria e come questi diversi livelli di organizzazione possono essere studiati con diverse metodologie spettroscopiche.
- i principi e i metodi per la cristallografia a raggi X applicata a proteine.
- come la struttura 3D di una proteina influenza la sua funzione.
- perché l'ossigeno molecolare deve essere attivato da diversi enzimi e quali cofattori contribuiscono a questa attivazione.

Nella parte delle esercitazioni, lo studente imparerà a generare da una sequenza primaria di una proteina un modello 3D in silico. Inoltre, avrà un'esperienza diretta di cristallizzazione delle proteine utilizzando il lisozima. Durante il corso gli studenti inoltre hanno la possibilità di presentare un recente articolo della letteratura in lingua inglese evidenziando anche la capacità di lavorare in gruppo

CAPACITÀ DI APPLICARE CONOSCENZA E COMPRESIONE

Al termine dell'insegnamento, lo studente sarà in grado di :

- Riconoscere e classificare le strutture proteiche.
- Comprendere come gli enzimi attivano l'ossigeno molecolare per applicazioni biocatalitiche che includono il metabolismo di farmaci e la green chemistry.
- Selezionare la tecnica spettroscopica appropriate per studi strutturali e funzionali di proteine.

- Visualizzare le strutture in 3D con software appropriati
- Utilizzare databases di sequenze e strutture proteiche

English

KNOWLEDGE & UNDERSTANDING

At the end of the course students will understand:

- the differences between elements of primary, secondary and tertiary structure;
- how these different levels of organization can be studied with spectroscopic techniques.
- principles and methods for X-ray crystallography applied to proteins.
- how the 3D structure of a protein influences its function,
- why molecular oxygen needs to be activated by different enzymes within bacteria and human and which cofactors contribute to this activation.

In the practicals, students will learn how to generate a protein 3D model in silico starting from a primary sequence. Moreover, the students will have direct experience of protein crystallization using lysozyme. During the course the students also get a chance to present a recent literature article in English highlighting their ability to work in teams.

APPLYING KNOWLEDGE & UNDERSTANDING

At the end of the course, the student will be able to:

- Recognize and classify protein structures.
- Understand how enzymes activate molecular oxygen for biocatalytic applications that include drug metabolism and green chemistry.
- Select the appropriate spectroscopic technique for structural and functional protein studies.
- View 3D structures with appropriate software
- Use databases of sequences and protein structures

MODALITA' DI INSEGNAMENTO

Italiano

Lezioni frontali: 42 ore, Esercitazioni in laboratorio: 12 ore

La frequenza alle lezioni è facoltativa, mentre al laboratorio è obbligatoria

English

Lectures: 42 hours; Practicals: 12 hours

Lecture attendance is optional, while practicals is compulsory.

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano

Prova scritta finale unica con 3 domande (80% voto finale), di cui due domande sul modulo della Prof. Sadeghi e una sul modulo della Dr. Di Nardo.

Ogni domanda ha un peso di 10 punti.

La relazione scritta sulla parte esercitativa di bioinformatica (modeling) viene valutata (10% del voto finale).

I seminari degli studenti vengono anche valutati (10% del voto finale).

Il voto finale è espresso in 30esimi.

La commissione d'esame si riserva di avere una discussione dell'elaborato al momento della registrazione del voto.

English

Final written exam with 3 questions (80%), two of them about the module of Prof. Sadeghi, one of them about the module of Dr. Di Nardo.

Each question is 10/30.

The written report on the bioinformatics (modeling) is evaluated (10 % of the final grade).

The seminars of the students are also assessed (10 % of the final grade).

The final grade will be expressed in a maximum of 30.

The examination committee reserves the right to have an oral exam to clarify the preparation of the student before registering to vote.

PROGRAMMA

Italiano

BASI STRUTTURALI DELLA FUNZIONE DELLE PROTEINE 1. Analisi della struttura 1aria, 2aria, 3aria e 4aria: a. Determinazione della sequenza aminoacidica-degradazione di Edman b. Legame peptidico, Ramachandran plot, struttura secondaria e terziaria c. Interazioni deboli nelle proteine d. Struttura quaternaria, assemblaggio 2. Classificazione e proprietà delle proteine e loro domini: a. Domini alfa b. Domini beta c. Domini alfa/beta d. Caratteristiche dei più comuni domini proteici e. Proteine di membrana 3. Protein dynamics: misura tramite spettroscopia ANALISI DELLA STRUTTURA PROTEICA 4. Struttura delle proteine: a. Confronto, classificazione, predizione b. Predizione di interazioni in complessi proteici 5. Modelling of protein structures: a. Data banks: Swissprot, PSI-BLAST, Multialign b. Uso di Swiss-Pdb-viewer e Yasara c. Predizione di struttura 2aria: utilizzo di 3D-PSSM e PSIPRED d. Generazione e analisi di Ramachandran plot e. Visualizzazione di e calcoli su strutture di proteine (solvent accessible area, distances, geometrie, surface potentials, molecular interactions) f. Ligand docking – teoria e utilizzo di Yasara g. cristallografia ai raggi x di proteina 6. Protein folding: a. concetti chiave e metodi b. Termodinamica c. Cinetica d. Effetto di denaturanti su folding e unfolding e. Il "molten globule" f. Folding funnels g. Folding patterns h. Protein misfolding e chaperons i. Proteins misfolding e patologie CHIMICA DELLE REAZIONE REDOX A CATALISI ENZIMATICA 7. Cofattori proteici e electron transfer nei sistemi biologici 8. Proteine eme a. Ciclo catalitico b. Legame dell'ossigeno- emoglobina c. Attivazione dell'ossigeno- citocromo ossidasi d. Aggiunta di ossigeno ai substrati- P450 i. Reazioni accoppiate e disaccoppiate ii. Specie reattive dell'ossigeno 9. Flavoproteine a. Electron transfer b. Monoossigenasi i. FMO- ciclo di reazione ii. Monoaminoossidasi iii. BVMO- applicazioni biotecnologiche 10. Proteine rame a. Classificazione b. Rame e electron transfer c. Rame e ossigeno d. Proteine contenenti rame e eme

English

STRUCTURAL BASIS OF PROTEIN FUNCTION 1. Analysis of lary, llary, llary and IVary structure: a. Determination of aminoacid sequence -Edman degradation b. Peptide bond, Ramachandran plot, secondary and tertiary structure c. Weak interactions in proteins d. Quaternary structure, assembly 2. Classification and properties of proteins and their

domains: a. Alfa domains b. Beta domains c. Alfa/beta domains d. Characteristics of the most common protein domains e. Membrane proteins 3. Spectroscopy techniques applied to protein structure determination ANALYSIS OF PROTEIN STRUCTURE 4. Protein structure: a. Comparison, classification and prediction b. Prediction of interactions in protein complexes 5. Modelling of protein structures: a. Data banks: Swissprot, PSI-BLAST, Multialign b. Use of Swiss-Pdb-viewer and Yasara c. Tertiary structure prediction: use of 3D-PSSM e PSIPRED d. Generation and analysis of the Ramachandran plot e. Visualisation of and calculations on protein structures (solvent accessible area, distances, geometry, surface potentials, molecular interactions) f. Ligand docking – theory and use of Yasara g. Protein X-ray crystallography 6. Protein folding: a. Key concepts and methods b. Thermodynamics c. Kinetics d. Effect of denaturants on rates of folding and unfolding e. The molten globule f. Folding funnels g. Folding patterns h. Protein misfolding and chaperons i. Protein misfolding and disease ENZYMATIC REDOX CHEMISTRY 7. Protein cofactors and biological electron transfer 8. Haem proteins a. Catalytic cycle b. Oxygen binding- haemoglobin c. Oxygen activation- cytochrome oxidase d. Oxygen addition to substrates- P450s i. coupled vs uncoupled reactions ii. reactive oxygen species 9. Flavo-proteins a. Electron transfer b. Monooxygenases i. FMO- reaction cycle ii. Monoamine oxidase iii. BMO- biotechnological applications 10. Copper proteins a. Classification b. Copper and electron transfer c. Copper and dioxygen d. Haem and copper proteins

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

Italiano

Il materiale didattico presentato a lezione è disponibile sul sito: <http://chimica.campusnet.unito.it/cgi-bin/home.pl> I testi base consigliati per il corso sono: - Branden e Tooze: Introduction to protein structure . Second Edition - Garland Publ Inc.. - A.M- Lesk: Introduction to protein science. Architecture, functions and genomics, Oxford University Press - C.A. Orengo, D.T. Jones & J.M. Thornton: Bioinformatics. Genes, protein & Computers - BIOS Scientific Publisher Limited - J.J.R. Fausto da Silva and R.J.P. Williams: The biological chemistry of the elements – Clarendon Press, Oxford University Press E' fortemente consigliato l'utilizzo del seguente materiale per approfondimenti e integrazioni: - presentazioni powerpoint e appunti delle lezioni; - articoli e reviews prese dalla letteratura come indicato durante le lezioni. Infine sono di seguito indicati siti internet di interesse: - www.expasy.ch - www.rcsb.org/pdb - www.biology.arizona.edu/biochemistry/biochemistry.html

English

The teaching material available on the following website and also directly from the lecturers: <http://chimica.campusnet.unito.it/cgi-bin/home.pl> The textbooks covering some of the material taught during the lectures include: - Branden e Tooze: Introduction to protein structure . Second Edition - Garland Publ Inc.. - A.M- Lesk: Introduction to protein science. Architecture, functions and genomics, Oxford University Press - C.A. Orengo, D.T. Jones & J.M. Thornton: Bioinformatics. Genes, protein & Computers - BIOS Scientific Publisher Limited - J.J.R. Fausto da Silva and R.J.P. Williams: The biological chemistry of the elements – Clarendon Press, Oxford University Press It is strongly advised to use the following material for studying and preparation of exam: - powerpoint presentations of the lectures ; - Articles and review papers mentioned during the lectures. For the section regarding in silica modelling of proteins the following websites will be used: - www.expasy.ch - www.rcsb.org/pdb - www.biology.arizona.edu/biochemistry/biochemistry.html

Pagina web del corso: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?_id=zcf8

CATALISI

Catalysis

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	CHI0050
Docenti:	Prof. Silvia Bordiga (Titolare del corso) Dott. Elena Clara Groppo (Titolare del corso)
Contatti docente:	<i>silvia.bordiga@unito.it</i>
Anno:	1° anno
Tipologia:	Caratterizzante
Crediti/Valenza:	6
SSD attività didattica:	CHIM/02 - chimica fisica
Erogazione:	Tradizionale
Lingua:	Italiano
Frequenza:	Facoltativa
Tipologia esame:	Orale

PREREQUISITI

chimica generale, chimica dei materiali, concetti di cristallografia, spettroscopia e microscopia, chimica fisica (orbitali atomici e molecolari; termodinamica e cinetica).

PROPEDEUTICO A

Tesi specialistica

OBIETTIVI FORMATIVI

Italiano

L'obiettivo principale dell'insegnamento consiste nell'introdurre gli studenti verso la conoscenza dei principi fondamentali che regolano l'attivazione di molecole semplici al fine di comprendere i principali meccanismi attraverso cui avviene un processo catalitico. Si cercheranno di esemplificare i concetti di attività, selettività, tempo di vita del catalizzatore e sua rigenerabilità mettendo in luce gli aspetti comuni della catalisi omogenea, eterogenea ed enzimatica. Si faranno conoscere le principali tipologie di catalizzatori e le attuali direzioni di sviluppo della catalisi industriale.

English

The main goal of the course is to introduce the students to the knowledge of the fundamental principles that regulate the activation of simple molecules in order to understand the main mechanisms through which a catalytic process works. Key studies will be used to explain concepts of activity, selectivity, life time of the catalyst, reactivation, and so on, underlining the common aspects of homogeneous, heterogeneous and enzymatic catalysis. Special attention will be devoted to know most common types of catalysts and current directions of development of the catalysis.

RISULTATI DELL'APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano

Lo scopo dell'insegnamento è di fornire le basi sui principi della catalisi dando una visione unificata dei concetti di reattività e selettività al fine di comprendere meglio le attuali direzioni di sviluppo della chimica moderna con particolare attenzione alla sostenibilità energetica e ambientale dei processi chimici. L'insegnamento si propone di fornire agli studenti strumenti teorici e dati sperimentali che permettano di: comprendere le relazioni tra

composizione, struttura e proprietà catalitiche delle principali tipologie di catalizzatori e di familiarizzare con alcuni tipologie di processi catalitici, come per esempio le reazioni di idrogenazione, di ossidazione parziale, di polimerizzazione.

English

The aim of the course is to provide the bases on the principles of catalysis by giving a unified vision of the concepts of reactivity and selectivity in order to better understand current directions of development of modern chemistry, with particular attention to energy efficiency and environmental sustainability of chemical processes. The course aims to give to the students the oretical and experimental instruments to understand the relationship between composition, structure and catalytic properties of the most commune types of catalysts and to get familiar with some catalytic processes such as hydrogenation reaction, partial oxidation and polymerization.

MODALITA' DI INSEGNAMENTO

Italiano

]

Lezioni frontali (48 ore)

English

Frontal lessons (48 hours)

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano

L'esame, unificato per i due docenti, è orale e sarà finalizzato alla verifica dell'apprendimento di quanto spiegato a lezione.

La valutazione avverrà in trentesimi.

English

The exam, a single one for both professors, is oral and will be devoted to verify the knowledge of what has been explained during the lessons.

The evaluation will be expressed in thirtieths.

ATTIVITÀ DI SUPPORTO

Italiano

Non sono previste attività di supporto

English

There are no support activity

PROGRAMMA

Italiano

INTRODUZIONE

Che cos'è un catalizzatore e su cosa agisce.

Catalizzatori omogenei ed eterogenei.

Un rapido excursus sui principali prodotti della chimica di base con cenni storici sulla loro produzione; dove la catalisi gioca un ruolo fondamentale.

I PROCESSI ALLA BASE DELLA CATALISI

Riconoscimento molecolare: il substrato deve poter accedere al sito attivo.

Adsorbimento: importanza della superficie nei catalizzatori eterogenei.

I processi di adsorbimento e la loro misura.

I COSTITUENTI FONDAMENTALI DI UN CATALIZZATORE

Fase attiva (single-site o multiple site), leganti (catalisi omogenea) e supporto (catalisi eterogenea), eventuale solvente.

Materiali ad alta area superficiale come supporti: ossidi e carboni.

I metodi principali di deposizione della fase attiva sul supporto.

Materiali microporosi che trovano applicazioni come supporti, ma anche come catalizzatori.

Rapido excursus sulle principali tecniche di caratterizzazione di un catalizzatore eterogeneo.

PRINCIPALI PROCESSI CATALITICI DI IMPORTANZA INDUSTRIALE

1) L'attivazione della molecola di idrogeno.

Catalizzatori di idrogenazione.

Il concetto di selettività nei catalizzatori di idrogenazione.

Relazione tra struttura, attività e selettività.

2) L'attivazione della molecola di azoto.

La sintesi dell'ammoniaca.

3) L'attivazione della molecola di CO.

La reazione di water gas shift.

Dal syn gas ai combustibili sintetici.

Il processo di Fisher-Tropsch e la sintesi del metanolo.

4) Dal metano agli idrocarburi.

Produzione di idrocarburi per la chimica di base e come combustibili.

Processi di cracking e fcc.

Da metanolo a idrocarburi e da metanolo a olefine.

5) Attivazione della molecola di NO.

Catalizzatori per la conversione degli NOx.

La marmitta catalitica.

6) Catalizzatori per la produzione di energia da fonti rinnovabili.

7) Cattura e conversione della CO₂

8) Attivazione della molecola di ossigeno.

Catalizzatori di ossidazione.

Il concetto di selettività nei catalizzatori di ossidazione: catalizzatori di ossidazione parziale.

9) L'attivazione delle olefine.

Catalizzatori di polimerizzazione e oligomerizzazione di olefine.

Il concetto di selettività nei catalizzatori di conversione delle olefine.

English

INTRODUCTION

What is it a catalyst?

Homogeneous and heterogeneous catalysts.

A quick excursus on the most common chemical products with historical mention about their production; where catalysis play a key role.

PROCESSES AT THE BASIS OF CATALYSIS

Molecular recognition: the substrate must reach the active site.

Adsorption: relevance of the surface in heterogeneous catalysts.

Adsorption phenomena and how to measure them.

MOST RELEVANT COMPONENT OF A CATALYST.

Active phase (single site, multiple site); ligands (homogeneous catalysis) and support (heterogeneous catalysis); the role of the solvent.

High surface area materials as supports: oxides and carbon.

Most common ways to deposit the active phase on the support.

Microporous materials that find applications as support, but also as catalysts.

Quick excursus on the most common techniques used to characterize an heterogeneous catalyst.

MOST COMMON CATALYTIC PROCESSES INDUSTRIALLY RELEVANT.

1) Activation of H₂.

Hydrogenation catalysts.

The concept of selectivity in case of hydrogenation catalysts.

Relationship among structure, activity and selectivity.

2) Activation of nitrogen.

Ammonia synthesis

3) Activation of CO.

The reaction of water gas shift.

From the syn gas to synthetic gasoline.

Fisher-Tropsch process and methanol synthesis.

4) From the methane to hydrocarbon.

Hydrocarbon production for chemicals and for fuels.

Cracking and fcc processes.

Methanol-to-hydrocarbon and methanol-to-olefin.

5) Activation of NO.

Catalysts for NO_x conversion.

The catalytic converter

6) Catalysts to produce Energy from renewable sources

7) Capture and conversion of CO₂.

8) Activation of O₂.

Oxidation catalysts.

The concept of selectivity in case of oxidation catalysts: catalysts for partial oxidation.

9) Activation of olefins.

Polymerization and oligomerization catalysts.

The concept of selectivity into the catalysts for olefin conversions

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

Italiano

Gli appunti del docente saranno disponibili in rete.

Il materiale per approfondimenti e integrazioni sarà eventualmente indicato dai docenti durante lo svolgimento del corso, e sarà reperibile nella Biblioteca Chimica o in rete.

English

Notes written by the teachers will be available online.

Additional research material will be suggested by the teachers along the course and it will be available at the library or online.

Pagina web del corso: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?_id=ppsv

CHEMIOMETRIA

CHEMOMETRICS

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	CHI0060
Docenti:	Prof. Marco Vincenti (Titolare del corso) Dott. Silvia Berto (Titolare del corso)
Contatti docente:	011.670.5264 - 011.670.5250, marco.vincenti@unito.it
Anno:	1° anno
Tipologia:	Caratterizzante
Crediti/Valenza:	6
SSD attività didattica:	CHIM/01 - chimica analitica
Erogazione:	Tradizionale
Lingua:	Italiano
Frequenza:	Facoltativa
Tipologia esame:	Orale

PREREQUISITI

italiano

Conoscenza dei principi di base dell'algebra lineare, e delle diverse discipline chimiche (analitica, fisica, organica e inorganica).

english

Knowledge of the basic principles of (1) vector and matrix algebra, (2) analytical, physical, organic, and inorganic chemistry.

OBIETTIVI FORMATIVI

italiano

Apprendimento dei più comuni strumenti di statistica adatti ad un'analisi chemiometrica multivariata di risultanze chimico-analitiche. Capacità di affrontare problematiche di analisi chemiometrica multivariata, attraverso la scelta opportuna degli strumenti statistici adatti, al fine di ricavarne elementi di giudizio (decision making) fondati su procedimenti inferenziali compiuti. Capacità di applicare i concetti teorici appresi a casi concreti di analisi in laboratorio.

english

Learning of the most common statistical tools to conduct multivariate chemometric analyses of large datasets. Ability to develop an original chemometric strategy to tackle complex problems of experimental design and classifications, by means of the correct choice of statistical approaches. Ability to use a suitable statistical strategy to obtain grounded decision making policies, based on sound inferential procedures. Ability to apply the acquired theoretical concepts to real cases of laboratory analysis.

RISULTATI DELL'APPRENDIMENTO ATTESI

italiano

Il presente corso di insegnamento richiama importanti concetti appresi di algebra lineare ed esprime i nuovi contenuti statistici con necessità di astrazione logica. Pertanto, il programma presentato a lezione dovrà essere assimilato attraverso la riflessione personale e collettiva nello studio. Al termine di questo processo, lo studente

dovrà essere in grado di padroneggiare sufficientemente la materia, in modo da poter descrivere gli argomenti con terminologia appropriata e secondo sequenze ordinate, logiche e consequenziali di causa ed effetto. Dovrà inoltre dimostrare di saper applicare i concetti studiati a contesti di applicazione pratica in laboratorio.

english

The present course recalls fundamental concepts of linear algebra and express the new content of statistics with substantial in-depth mathematical abstraction. Therefore, the program explained in classroom should necessarily be integrated by personal and collective thinking over during homework. At the end of this process, the students should exhibit adequate control of the subject and be able to describe the different topics with appropriate terms, following orderly, rational, and consequent sequences of cause and effect. They should also be able to apply the learned concepts to contexts of practical application in laboratory experiments.

MODALITA' DI INSEGNAMENTO

italiano

L'insegnamento si compone di 32 ore di lezione frontale (4 CFU) e 32 ore di attività di laboratorio (2 CFU). L'attività di laboratorio è programmata mediante tecniche di disegno sperimentale e propone esperienze pratiche di applicazione di tecniche analitico-strumentali a tematiche scelte dagli studenti, nei limiti della strumentazione disponibile. I risultati sono infine interpretati su base chemiometrica. Le esercitazioni di laboratorio hanno frequenza obbligatoria, si richiede la partecipazione ad almeno l'80% delle ore.

english

The course includes 32 hours of classroom teaching (4 CFU) and 32 hours of laboratory activity (2 CFU). The laboratory activity is programmed by means of techniques of experimental design and proposes practical applications of instrumental analysis, in which the subjects are chosen by the students, within the limits of the available instrumentation. Frequency to the laboratory is mandatory, the participation to the 80% of the hours is required.

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

italiano

La verifica si svolge oralmente, ha una durata di circa 45-60 minuti, e rappresenta un momento significativo di didattica individualizzata. Allo studente viene chiesto di illustrare concetti in modo logico e concatenato, esprimere definizioni usando terminologia appropriata, rispondere a domande puntuali, dedurre logicamente conseguenze e/o modalità di applicazione pratica dei concetti teorici appresi. Le componenti di coerenza narrativa, di comprensione fenomenologica e di capacità deduttiva sono tenute nella massima considerazione, mentre non è data importanza ai dettagli meramente mnemonici. Per sviluppare le suddette competenze è fortemente consigliato lo studio a gruppi, dove siano possibili la discussione degli argomenti, il confronto di idee e l'illustrazione reciproca dei concetti e dei contenuti, mentre tale condivisione dell'apprendimento non è realizzata nello studio individuale.

Finalità ultima dell'esame è quella di mettere lo studente di fronte alla propria preparazione riguardo gli argomenti trattati durante le lezioni frontali e alla competenza acquisita durante le attività laboratoriali, oltretutto alla capacità di rappresentare tale competenza di fronte a soggetti terzi. Per la valutazione finale, sarà inoltre tenuto in considerazione il coinvolgimento dello studente nelle attività proposte dai docenti.

english

An oral examination of the candidate is conducted along 45-60 minutes, and represents a significant stage of individualized teaching. The student is asked to illustrate theoretical concepts in a logical sequence, to express definitions using appropriate nomenclature, to answer to specific questions, to logically deduce consequences and/or practical operating conditions from the learned theoretical concepts. The aspects of narrative coherence, phenomenology understanding, and deducing proficiency are considered at the highest grade, whereas minimal importance is attributed to mnemonic details. In order to develop this expertise, it is strongly recommended to

study within groups, so as to allow wide discussion of concepts, comparison of interpretations, and reciprocal explanation of content and ideas. These fundamental practices are not allowed by individual study.

Ultimate objective of the exam is to make evident to the student how deep it is its study of the theoretical knowledge, how this knowledge has been translated into real expertise, and how far they are made capable of transferring their competence to a third person. The involvement of the student in the activities proposed by the teachers will also be taken into account for the final evaluation.

ATTIVITÀ DI SUPPORTO

Gli studenti vengono organizzati in gruppi da due-tre. Di tanto in tanto, il flusso delle lezioni viene interrotto per consentire un ripasso all'interno dei gruppi sul materiale didattico svolto, mentre il Docente passa di gruppo in gruppo per fornire chiarimenti. Idealmente, ciascun gruppo prepara e sostiene congiuntamente l'esame di profitto finale.

PROGRAMMA

italiano

Il corso presenta gli strumenti statistici e chemiometrici più efficaci per effettuare un'analisi multivariata delle risultanze analitiche, e per indirizzare il processo decisionale.

Il principio utilitaristico nella rappresentazione scientifica della realtà. Sistemi di qualità: obiettivi, progettazione, azione, verifica. Le problematiche complesse: origine, definizione e metodi per affrontarle. La struttura multivariata delle problematiche complesse. Effetti olistici e macroproprietà dei sistemi. Ruolo della chemiometria nella soluzione dei problemi complessi. La struttura multivariata dei dati. Rappresentazione dei dati in forme matriciali. Le scale di misura dei dati. Trasformazioni matematiche e scalature dei dati. Analisi statistica multivariata. Concetti di distanza fra punti sperimentali, correlazione, covarianza. Analisi della varianza. Analisi delle componenti principali e rappresentazioni grafiche: diagrammi dei loadings e scores. Cluster analysis e rappresentazioni grafiche; metodi di clustering gerarchici e non gerarchici. Disegno sperimentale. Funzione obiettivo e sua modellizzazione in funzione dei parametri sperimentali. Regressione e verifica di modelli. Schemi di disegni sperimentali. Tecniche decisionali. Metodi sequenziali. Analisi di classificazione e modellamento di classe. Metodi modellanti e non-modellanti. Matrice di confusione e delle perdite e loro significato. Probabilità a priori e suo significato in statistica Bayesiana. Test diagnostici e rappresentazioni grafiche in analisi di classificazione. Le curve ROC. Metodi di classificazione: K-NN, SIMCA, analisi discriminante lineare e quadratica. Variabili canoniche. Regressione lineare semplice e multipla. Ordinary Least Squares Regression in algebra matriciale. Stepwise OLSR e PCR: principi e proprietà. Validazione di un modello di regressione e parametri di valutazione. Partial Least Squares Regression su una o più variabili dipendenti. Complessità e prestazioni dei modelli PLS-R. Uso della PLS nell'analisi discriminante. Esempi di applicazioni pratiche.

english

The course introduces the most effective statistical and chemometric techniques for executing a multivariate analysis of experimental data and to orient the decision making.

Complex systems: origin, definition, and methods to approach them. The multivariate structure of complex systems. Holistic effects and macro-properties of complex systems. Role of chemometrics in the solution of complex problems. The multivariate structure of data. Data organization in matrices. Measurement units. Mathematical transformation and scaling of data. Multivariate statistical analysis. Concepts of distance between experimental points, similarity, correlation, and covariance. Analysis of variance. Principal components analysis and graphical representations: loadings and scores diagrams. Cluster analysis and its graphical plot; hierarchical vs. non-hierarchical, agglomerative vs. non-agglomerative clustering methods. Experimental design. Objective function and its modelling as a function of the experimental parameters. Regression techniques and model testing. Schemes used in experimental analysis. Decision making. Sequential methods. Classification analysis and class-modelling. Modelling and non-modelling methods. Confusion and loss matrices. Prior odds and its meaning in Bayesian statistics. Diagnostic test in classification analysis. Receiver operating characteristic curves. Classification methods:

K-NN, SIMCA, Linear and quadratic discriminant analysis. Canonical variables.

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

italiano

Strumenti di apprendimento di base consigliati per il corso sono gli appunti delle lezioni e il materiale didattico messo a disposizione sul sito internet del corso di laurea.

E' consigliato l'utilizzo del seguente materiale per approfondimenti e integrazioni:

R. Todeschini, Introduzione alla chemiometria, 1998, EdiSES

M. Forina, Fondamenta per la Chimica Analitica, e-book (ISBN 9788890406461)

M. Otto, Chemometrics, 2007, Wiley-VCH Verlag, Germany

R.G. Brereton, Applied Chemometrics for Scientists, 2007, John Wiley & Sons Ltd., England

R.G. Brereton, Chemometrics. Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant, 2003, John Wiley & Sons Ltd., England

Infine sono di seguito indicati siti internet di interesse:

<http://www.sisnir.org/index.php/edsisnir/10-fondamenti-di-chemiometria> (e-book di M. Forina)

english

Basic support to the learning is provided by the notes taken during classroom explanations, together with the slides and files loaded into the internet page of the course.

This learning material can be integrated by consulting the books indicated below.

R. Todeschini, Introduzione alla chemiometria, 1998, EdiSES

M. Forina, Fondamenta per la Chimica Analitica, e-book (ISBN 9788890406461)

M. Otto, Chemometrics, 2007, Wiley-VCH Verlag, Germany

R.G. Brereton, Applied Chemometrics for Scientists, 2007, John Wiley & Sons Ltd., England

R.G. Brereton, Chemometrics: Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant, 2003, John Wiley & Sons Ltd., England

Lastly, the following internet link provide free access to the e-book by M. Forina:

<http://www.sisnir.org/index.php/edsisnir/10-fondamenti-di-chemiometria>

NOTA

italiano

La frequenza alle lezioni è consigliata, ma non obbligatoria. Per gli studenti che non frequentino le lezioni, al fine di ottenere una preparazione completa, è necessario procurarsi una copia degli appunti delle lezioni dai compagni che le frequentano.

english

The frequency to the lessons is recommended, but not compulsory. In order to achieve complete coverage of the teaching, the students not frequenting the lessons are recommended to obtain copy of the notes taken during the

class from their classmates.

Pagina web del corso: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?_id=a12x

CHIMICA AGRARIA

AGRICULTURAL CHEMISTRY

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	CHI0062
Docente:	Prof. Luisella Roberta CELI (Titolare del corso)
Contatti docente:	0116708515, luisella.celi@unito.it
Anno:	1° anno 2° anno
Tipologia:	Affine o integrativo
Crediti/Valenza:	6
SSD attività didattica:	AGR/13 - chimica agraria
Erogazione:	Tradizionale
Lingua:	Italiano
Frequenza:	Facoltativa
Tipologia esame:	Scritto più orale obbligatorio

PREREQUISITI

Conoscenza delle principali tecniche analitiche e spettroscopiche

OBIETTIVI FORMATIVI

Italiano

L'insegnamento fornisce agli studenti gli strumenti per la conoscenza del suolo come fonte di nutrizione per il vegetale e come risorsa non rinnovabile nell'ecosistema terrestre. L'insegnamento inoltre si propone di presentare i principali processi che regolano reazioni biotiche ed abiotiche all'interfaccia solido-soluzione. L'obiettivo è quello di acquisire una conoscenza di base dei costituenti del suolo, delle sue proprietà chimico-fisiche e dei processi che regolano i cicli biogeochimici degli elementi nutritivi. Lo studente acquisirà così le conoscenze necessarie per comprendere le relazioni che esistono tra il suolo e i vegetali ed il ruolo del suolo nell'ecosistema agro-forestale. Avrà altresì la possibilità di comprendere le problematiche relative all'applicazione di tecniche analitiche e spettroscopiche per lo studio di un sistema naturale complesso quale il suolo.

English

The course provides students with the tools for the knowledge of soil as a source of nutrients for the plant and as a non-renewable resource in the terrestrial ecosystem.

The course also aims to present the main processes regulating biotic and abiotic reactions at the solid-solution interface

The goal is to acquire a deep knowledge of the soil constituents and of chemical and physical processes governing the biogeochemical cycling of nutrients. The student will then acquire the necessary knowledge to understand the relationships that exist between soil and plant and the role of soil in the agroforest ecosystem. He/she will also have the opportunity to understand the issues relating to the implementation of analytical and spectroscopic techniques for the study of a complex matrix such as soil.

RISULTATI DELL'APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano

I principali risultati attesi sono la capacità di valutare quali sono le reazioni chimiche e biochimiche che avvengono in sistemi naturali, la capacità di individuare tutti i fattori che possono controllare una reazione chimica in una matrice

complessa e l'applicazione di tecniche analitiche e spettroscopiche per la speciazione di nutritivi e contaminanti in ecosistemi naturali o antropizzati

English

The main expected results are the ability to assess what are the chemical and biochemical reactions that occur in natural systems, the ability to identify all the factors that can control a chemical reaction in a complex matrix and apply analytical and spectroscopic techniques for speciation of nutrients and contaminants in natural and anthropogenic ecosystems.

MODALITA' DI INSEGNAMENTO

Italiano

Lezioni frontali. Esercitazioni in aula con l'ausilio di PC. Escursioni con visita a siti sperimentali

English

Lectures. Exercises in the classroom with the help of PC. Excursions with visits to experimental sites.

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano

Alla fine di ogni argomento si svolgeranno esercitazioni con correzione e discussione in aula. Alla fine del corso sarà effettuata una simulazione d'esame. Tutte le verifiche svolte durante il corso hanno puramente valore di autovalutazione.

L'esame finale consta di una prova scritta su un particolare caso studio in cui si dovranno interpretare dati quantitativi o spettri e formulare ipotesi sui possibili processi/meccanismi in atto. A questo seguirà un orale dove si deve dimostrare l'apprendimento delle conoscenze teoriche e la capacità di elaborazione dei dati numerici e dei meccanismi che guidano i processi negli ecosistemi. Il superamento dello scritto è vincolante per l'orale. Il voto sarà espresso in trentesimi e deriverà dalla media della prova scritta e orale

English

At the end of each topic I will do exercises with correction and discussion. At the end of the course I will do an exam simulation. All audits carried out during the course have value of purely self-assessment.

The final exam consists of a written part where students have to data and spectra of a particula case study and find hypothesis on potential processes/mechanisms which drive the system. This will be followed by an oral examination, where students must answer to questions of theoretical knowledge and demonstrate their capacity to interpret data and mechanims involved in the processes controlling ecosystems. Passing the written part is mandatory for the final oral. The mark will be in /30 and will be calculated as the mean of the written and oral result.

PROGRAMMA

Italiano

Introduzione: il suolo come comparto ambientale all'interfaccia con l'atmosfera, l'idrosfera e la biosfera

Fattori di formazione del suolo, il profilo e gli orizzonti. Gli elementi costituenti la crosta terrestre

Le matrici complesse

Le fasi solide del suolo: i componenti minerali e la sostanza organica

Le rocce ignee, metamorfiche e sedimentarie. I minerali delle rocce

I minerali argillosi: proprietà di superficie e tecniche di analisi della SSA, densità di carica e potenziale elettrico.

La sostanza organica: origine, composizione biochimica dei residui vegetali e processi di decomposizione biotica e abiotica. Tecniche di separazione chimico-fisica e caratterizzazione spettroscopica

Interazione della sostanza organica con la fase minerale: processi di stabilizzazione fisica e fisico-chimica

La soluzione del suolo: composizione e speciazione dei principali elementi

Processi che regolano la speciazione di nutrienti e contaminanti all'interfaccia solido-soluzione

Adsorbimento, desorbimento: isoterme di adsorbimento, modelli, meccanismi di adsorbimento, tecniche analitiche e spettroscopiche per la determinazione del meccanismo di adsorbimento, fattori che controllano l'adsorbimento

Dissoluzione, precipitazione, coprecipitazione di specie nutritive e contaminanti

Dinamiche degli elementi nutritivi:

Ciclo dell'N: processi biologici e chimico fisici che regolano la speciazione dell'N. Tecniche di separazione chimico-fisica e caratterizzazione spettroscopica

Ciclo del P: processi biologici e chimico fisici che regolano la speciazione dell'N. Tecniche di separazione chimico-fisica e caratterizzazione spettroscopica

Il suolo come risorsa non rinnovabile: aspetti ambientali

Destino degli xenobiotici nell'ambiente: reazioni biotiche e abiotiche. Tecniche di separazione chimico-fisica e caratterizzazione spettroscopica

Caso studio: Valutazione di un caso studio, con visita al sito sperimentale, presentazione di strumenti chimici da campo, descrizione dei profili di suolo e discussione sulle principali proprietà chimico-fisiche del suolo

English

Introduction: the soil as the environmental compartment at the interface with the atmosphere, hydrosphere and biosphere

Factors of soil formation, the profile and horizons. The elements in the earth's crust

The complex matrices

The soil solid phases: mineral phase and organic matter

Igneous, metamorphic and sedimentary rocks. The minerals of the rocks

The clay minerals: surface properties and analysis techniques for the determination of SSA, charge density and electrical potential.

Organic matter: origin, biochemical composition of plant residues and biotic and abiotic decomposition processes.

Chemical-physical separation techniques and spectroscopic characterization

Interaction of organic matter with the mineral phase: physical and physico-chemical stabilization processes

The soil solution: composition and speciation of the main elements

Processes controlling the speciation of nutrients and contaminants at the solid-solution

Adsorption, desorption: adsorption isotherms, models, mechanisms of adsorption, analytical and spectroscopic techniques for the determination of the adsorption mechanisms, factors controlling adsorption

Dissolution, precipitation, co-precipitation of species nutrients and contaminants

Nutrients dynamics:

N cycle: physical and biological processes that regulate the chemical speciation of N. Chemical-physical separation techniques and spectroscopic characterization

P cycle: chemical and biological processes controlling P speciation. Chemical-physical separation techniques and

spectroscopic characterization

The soil as a non-renewable resource: environmental aspects

Fate of xenobiotics in the environment: biotic and abiotic reactions. Separation techniques and spectroscopic characterization

Case study: Evaluation of a case study, with a visit to an experimental site, presentation of field chemical equipment, description of soil profiles and discussion on physical and chemical soil properties.

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

Italiano

Il materiale didattico presentato a lezione è disponibile presso:

L. Celi, DISAFA; Chimica Agraria e Pedologia, appunti delle lezioni.

I testi base consigliati per il corso sono:

Paolo Sequi Chimica del suolo Patron editore

English

L. Celi, DISAFA; Chimica Agraria e Pedologia, slides.

Paolo Sequi Chimica del suolo Patron editore

Pagina web del corso: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?_id=n48q

CHIMICA BIOINORGANICA

Bioinorganic chemistry

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	CHI0051
Docente:	Dott. Elena Maria Ghibaudi (Titolare del corso)
Contatti docente:	011-6707951, elena.ghibaudi@unito.it
Anno:	1° anno 2° anno
Tipologia:	Caratterizzante
Crediti/Valenza:	6
SSD attività didattica:	CHIM/03 - chimica generale e inorganica
Erogazione:	Tradizionale
Lingua:	Italiano
Frequenza:	Facoltativa
Tipologia esame:	Orale

PREREQUISITI

Biochimica; Chimica inorganica; Fondamenti di spettroscopie

OBIETTIVI FORMATIVI

italiano

L'insegnamento si propone di fornire agli studenti alcune conoscenze avanzate di chimica inorganica e di coordinazione, applicate ai sistemi di interesse biochimico, e di porle in relazione con le conoscenze apprese nei corsi propedeutici di Biochimica e di Chimica inorganica. I contenuti di questo insegnamento si intersecano e complementano con quelli degli insegnamenti di Biochimica strutturale e funzionale, Complessi Metallici e Metodologie di sintesi e sviluppo farmaceutico, al fine di fornire agli studenti gli strumenti per una lettura a livello atomico-molecolare delle problematiche legate al mondo chimico-biologico, in linea con gli obiettivi formativi del Corso di laurea.

inglese

This teaching aims to provide students with some advanced knowledge in the field of coordination and inorganic chemistry applied to biological systems; this knowledge will be connected to the content of propedeutical teachings, i.e. biochemistry and inorganic chemistry. The contents of this teaching intertwine and complement the contents of other teachings, such as Structural and Functional Biochemistry, Metal complexes and Synthesis and Development Methodologies. The final aim is to provide students with conceptual and practical tools for analysing the chemical-biological realm under an atomic-molecular perspective, in line with the main goal of the Master Degree in Chemistry.

RISULTATI DELL'APPRENDIMENTO ATTESI

italiano

Al termine del percorso didattico gli studenti dovranno essere in grado di identificare gli elementi metallici della tavola periodica che esplicano un ruolo biologico o farmacologico; dovranno conoscere le principali proprietà funzionali e strutturali dei loro complessi ed essere in grado di metterle in relazione con le proprietà chimico-fisiche dei rispettivi metalli e dei loro composti; gli studenti dovranno inoltre saper individuare le tecniche di caratterizzazione più adatte per le diverse tipologie di centri metallici nel contesto biologico.

inglese

After taking this course, students are expected to be able to identify the chemical elements that are biologically or pharmacologically active; they should know their main functional and structural properties and be able to put them

in relationship with their chemico-physical properties. Students are also expected to be able to identify the characterization techniques more suitable for any kind of metallic centre found in the biological context.

MODALITA' DI INSEGNAMENTO

italiano

Il corso sarà erogato in parte mediante didattica frontale e in parte mediante didattica seminariale. Sono previsti interventi degli studenti su temi specifici concordati con il docente: le loro presentazioni saranno oggetto di verifica ai fini della valutazione finale dell'apprendimento.

inglese

The teaching will be partly frontal and partly in the form of seminars held by students, under the supervision of the teacher. Students will make presentations on specific topics, chosen in agreement with the teacher: these presentations will concur to the overall evaluation score of this teaching.

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

italiano

La valutazione finale sarà organizzata in due momenti distinti:

- una prova orale sui contenuti fondamentali dell'insegnamento
- una presentazione di carattere seminariale, nel corso della quale lo studente dovrà illustrare un argomento inerente la chimica bioinorganica, tratto dalla recente letteratura scientifica, preventivamente concordato con il docente. Saranno valutati: la capacità dello studente di individuare e sintetizzare le informazioni cruciali dell'argomento prescelto; la correttezza di tali informazioni; la chiarezza espositiva e la coerenza logica dell'esposizione.

inglese

The evaluation will occur in two distinct moments:

- an oral interview on the basic topics developed during this teaching
- an oral presentation of a topic - agreed with the teacher - related with bioinorganic chemistry, made by the student and based on recent bibliographic data. Object of the evaluation will be: the ability of the student to identify and summarise the main information related with the chosen topic; the disciplinary accuracy of such information; the clarity and logical consistency of the presentation.

ATTIVITÀ DI SUPPORTO

Nessuna

PROGRAMMA

italiano

L'evoluzione dell'ambiente terrestre e i meccanismi di selezione degli elementi chimici da parte della biosfera.

Uno sguardo chimico-fisico sul fenomeno vita.

La biodisponibilità degli elementi ed i meccanismi molecolari di regolazione omeostatica dei metalli: assimilazione, trasporto, stoccaggio di ioni metallici nei sistemi viventi.

Le relazioni tra proprietà chimiche e ruolo biologico degli elementi biologicamente attivi.

Classificazione dei siti metallici delle biomolecole.

Principi di chimica di coordinazione applicata ai siti di legame metallico nelle biomolecole

Metodiche di caratterizzazione dei complessi metallici nei sistemi biologici.

Esempi di biomolecole contenenti siti di legame metallico in relazione al ruolo di questi ultimi: strutturale, catalitico, regolatore, ecc.

Il coinvolgimento dei metalli nell'insorgenza di alcune patologie: Alzheimer, Parkinson, ecc.

Esempi di utilizzo terapeutico dei metalli.

inglese

The evolution of the environment on the Earth and the mechanism of selection of chemical elements by the biosphere.

A chemico-physical glance to living systems.

Bioavailability of chemical elements and the chemical mechanisms of metals' homeostatic regulation: uptake, transport and storage of metal ions in living systems.

Relationships between chemical properties and biological function of biologically active elements.

Classification of metal binding sites in biomolecules.

Principles of coordination chemistry applied to metal binding sites in biomolecules.

Insights into the characterisation methods of metal complexes in biological systems.

A survey of biomolecules containing metal binding sites, in relation to their role: structural, catalytic, regulatory, etc.

The involvement of metals in the etiology of some pathologies: Alzheimer, Parkinsons, etc.

Examples of therapeutic use of metals.

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

italiano

Frausto da Silva and Williams - The Biological Chemistry of the Elements: The Inorganic Chemistry of Life – Oxford University Press

Rosette M. Roat-Malone - Bioinorganic chemistry: A short course (Wiley) - E-book

Chrichton - Biological inorganic chemistry: an introduction (Elsevier) - E-book

Lippard, Berg - Principles of bioinorganic chemistry (University Science Books)

inglese

Frausto da Silva and Williams - The Biological Chemistry of the Elements: The Inorganic Chemistry of Life – Oxford University Press

Rosette M. Roat-Malone - Bioinorganic chemistry: A short course (Wiley) - E-book

Chrichton - Biological inorganic chemistry: an introduction (Elsevier) - E-book

Lippard, Berg - principles of bioinorganic chemistry (University Science Books)

CHIMICA COMPUTAZIONALE

COMPUTATIONAL CHEMISTRY

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	CHI0056
Docente:	Prof. Bartolomeo Civalleri (Titolare del corso)
Contatti docente:	+39-011-6707564, bartolomeo.civalleri@unito.it
Anno:	1° anno 2° anno
Tipologia:	Di base
Crediti/Valenza:	6
SSD attività didattica:	CHIM/02 - chimica fisica
Erogazione:	Tradizionale
Lingua:	Italiano
Frequenza:	Obbligatoria
Tipologia esame:	Orale

OBIETTIVI FORMATIVI

Italiano

Il corso si propone di fornire agli studenti un'introduzione al linguaggio e una panoramica degli strumenti di calcolo classici (meccanica molecolare) e quantistici (ab initio) utilizzati nella moderna chimica computazionale molecolare. L'obiettivo principale è mostrare come tali metodi, implementati in programmi di calcolo di uso comune, permettano lo studio modellistico di molecole di interesse.

English

The course aims at providing the basics and principles of computational chemistry. By starting from the definition of the potential energy surface, both methods of classical molecular dynamics and quantum-mechanical ab-initio methods are introduced and discussed. The main purpose is to show how such methods as implemented in current standard molecular modelling codes can be used to simulate and predict the properties of molecules.

RISULTATI DELL'APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano

L'allievo dovrà essere in grado di:

- conoscere che cosa si intende con approccio computazionale in chimica e come questo stia diventando uno strumento importante nella ricerca scientifica e un utile complemento all'attività sperimentale;
- conoscere le basi teoriche dei metodi di calcolo più comunemente usati nella chimica computazionale;
- apprendere l'utilizzo base di programmi di calcolo, in particolare del programma Gaussian, per lo studio di sistemi molecolari

English

Main goals of the course are to introduce the students

- to the meaning of computational chemistry and how it is now largely adopted in research laboratory as a complementary tool to experiments
- to make them familiar with the fundamental principles of the both classical and quantum-mechanical approximate methods for studying molecules
- to know the basic use of a modern molecular modelling program such as Gaussian to study molecules and

clusters.

MODALITA' DI INSEGNAMENTO

Italiano

La metodologia didattica impiegata consiste quindi in:

- a) 32 ore di lezioni in aula
- b) 32 ore di esercitazioni nel laboratorio informatico

Le lezioni in aula forniscono le basi teoriche dei metodi di calcolo della meccanica molecolare e quantistici ab initio partendo dai fondamenti della meccanica quantistica e introducendo progressivamente metodi sempre più sofisticati per la risoluzione dell'equazione di Schrödinger. I limiti, i meriti e i costi computazionali dei vari metodi vengono anche discussi.

In parallelo, le esercitazioni offrono la possibilità di applicare i metodi introdotti a lezione allo studio delle proprietà chimico-fisiche di alcune semplici molecole e addotti molecolari. In particolare, viene fatto uso di uno dei programmi di calcolo più comunemente impiegati nei laboratori di ricerca: Gaussian. Gli esempi presentati permettono allo studente di verificare come sia possibile, usando opportuni software e gli odierni computer da tavolo, condurre veri e propri esperimenti al calcolatore. Durante il laboratorio gli studenti dovranno preparare delle schede riassuntive di commento ai moduli esercitativi proposti.

English

The course is subdivided in

- a) Lectures (32 h)
- b) Practical work in the computer room (32 h)

Lectures provide the theoretical background of both molecular mechanics and quantum-mechanical ab-initio methods. Advantages, limits, costs of the various methods are discussed.

Practical work offers to the students the possibility to use a modern computational tool as Gaussian to investigate the properties of simple molecules and molecular adducts. Guided examples show the clever use of the computer to run virtual experiments. During the laboratory, students have to prepare a short report and comment on the results of the practical work.

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano

Esame Orale sugli argomenti trattati a lezione. Alla fine del laboratorio gli studenti dovranno preparare una breve relazione sulle esercitazioni svolte.

English

Oral examination on the topics discussed during the lectures. At the end of the laboratory, students have to prepare a short report and comment on the results of the practical work.

PROGRAMMA

Italiano

Lezioni frontali

Definizione e significato di chimica computazionale. Accenni alla simulazione multiscala

Definizione di superficie di energia potenziale. Ottimizzazione di geometria e calcolo delle frequenze vibrazionali

Metodi della meccanica molecolare: definizioni, campo di forza, esempio di campo di forza, usi, risultati

Richiami di meccanica quantistica: notazione bra-ket, postulati, stati stazionari, unità atomiche

Metodi approssimati in meccanica quantistica: principio variazionale e metodo variazionale lineare, metodo perturbativo

Discussione dell'Hamiltoniano multielettronico e principali approssimazioni introdotte: approssimazione di Born-Oppenheimer, approssimazione spin-orbitale.

Principio di antisimmetria. Prodotto di Hartree e determinante di Slater. Determinante di Slater come autofunzione di S_z e S^2 .

Il metodo di Hartree-Fock: espressione dell'energia e equazioni. Teorema di Koopman Equazioni di Roothaan e ciclo SCF. Definizione di set base.

Set base gaussiani: forma, classificazione ed esempi. Effective Core Pseudopotential (ECP) e BSSE Proprietà mono-elettroniche (densità di carica, potenziale elettrostatico, .)

Il problema della correlazione elettronica. Breve panoramica dei metodi post-Hartree-Fock: variazionali (interazione di configurazioni, CI), perturbativi (metodo Møller-Plesset) e Coupled-Cluster (CC).

Introduzione alla teoria del funzionale della densità (DFT) e ai metodi derivati: teoremi di Hohenberg-Kohn, formalismo e equazioni di Kohn-Sham, funzionale di scambio-correlazione e sue approssimazioni

Confronto e valutazione dei principali metodi di calcolo ab-initio attualmente disponibili

Laboratorio

Modulo 1 - Introduzione all'uso del programma di calcolo Gaussian. Preparazione dell'input e discussione dell'output. Uso di strumenti di grafica molecolare per l'analisi dell'output. Definizione della geometria di una molecola attraverso la costruzione della matrice Z ed uso di costruttori molecolari

Modulo 2 - Analisi conformazionale e calcolo di barriere di rotazione con la meccanica molecolare: da molecole semplici a molecole di interesse farmacologico

Modulo 3 - Individuazione dei punti stazionari sulla PES della molecola di urea e loro classificazione. Analisi della struttura elettronica della molecola di urea (orbitali molecolari, densità elettronica, potenziale elettrostatico)

Modulo 4 - Studio del dimero dell'acqua. Analisi del cambiamento delle proprietà strutturali, elettroniche e vibrazionali della molecola isolata dopo la formazione del dimero. Confronto tra metodi di calcolo e dati sperimentali

English

Lectures

A computational approach to chemistry: definition of computational chemistry. Multiscale modeling: approaches and strategies

Definition of the potential energy surface. Discussion of the meaning of geometry optimization and vibrational frequencies calculation

Molecular mechanics: assumptions, definition of a force field, example of a force field, classification and applications of molecular mechanics, advantages and limitations

Brief overview of quantum mechanics: postulates, Dirac's notation (bra-ket), definition of a stationary state, atomic

units

Approximated methods in quantum mechanics: the variational principle and the linear variational method; perturbation theory

Many electrons Hamiltonian: definition and approximations. Born-Oppenheimer approximation. Spin-orbitals approximation.

The Antisymmetry principle. The Hartree product and the Slater determinant. The Slater determinant as an eigenstate of the spin operators (S_z and S^2).

The Hartree-Fock approximation: total energy and equations. Koopman's theorem Introduction of a basis: the Roothaan equations. The SCF cycle.

Definition of a basis set. Gaussian-type basis sets: classification, notation and examples. Effective-Core-Pseudopotential (ECP). The basis set superposition error (BSSE). One-electron properties (charge density, electrostatic potential, .)

The electron correlation problem: form of the exact wave function. Brief overview of Post-HF methods: configuration interaction (CI), second-order perturbation approximation (Moller-Plesset), coupled-cluster techniques (CC).

Fundamentals of density functional theory (DFT): Hohenberg-Kohn theorems, Kohn-Sham formalism and equations, exchange-correlation functional and main approximations

Comparison and assessment of current ab-initio methods

Practical work

Part 1 - How to use Gaussian for Windows. How to visualize molecular structures with graphical user interfaces such as GaussView and Moldraw. How to build a molecular structure: the Z-matrix and molecular builder

Part 2 - Molecular mechanics: conformational analysis and rotational energy barriers: from small molecules to drugs

Part 3 - Location of stationary points on the potential energy surface of urea molecule. Analysis of the electronic structure of urea and related properties (molecular orbitals, charge density, electrostatic potential)

Part 4 - Water dimer: geometry optimization and vibrational frequencies calculation. Visualization and analysis of computed data. Changes of structural features and vibrational frequencies of water molecule upon dimer formation. Comparison of the computed results with available experimental evidence

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

Italiano

I testi base consigliati per il corso sono: appunti delle lezioni e materiale usato nelle esercitazioni (forniti dal docente)

Il principale testo di riferimento è: F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 1999. In particolare, può essere di interesse consultare i capitoli: 1-6, 9 e 11

Altri utili riferimenti sono:

- C. J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry (Theories and Models), Wiley, 2002
- Levine, Quantum Chemistry, Prentice Hall, 2000, 2nd edition
- G. H. Grant, W. G. Richards, Computational Chemistry, Oxford University Press, 1995
- Szabo, N. S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry (Introduction to Advanced Electronic Structure Theory), McGraw-Hill, 1985

English

Lecture notes are available from the teacher

The main textbook is: F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 1999. In particular, chapters: 1-6, 9 e 11

For a more detailed discussion of computational chemistry methods, one can refer to:

- C. J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry (Theories and Models), Wiley, 2002
- Levine, Quantum Chemistry, Prentice Hall, 2000, 2nd edition
- G. H. Grant, W. G. Richards, Computational Chemistry, Oxford University Press, 1995
- Szabo, N. S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry (Introduction to Advanced Electronic Structure Theory), McGraw-Hill, 1985

Pagina web del corso: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?_id=kof3

CHIMICA DELLO STATO SOLIDO

SOLID STATE CHEMISTRY

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	CHI0055
Docente:	Prof. Maria Cristina Paganini (Titolare del corso) Dott. Anna Maria Ferrari (Titolare del corso)
Contatti docente:	0116707576, mariacristina.paganini@unito.it ;
Anno:	1° anno
Tipologia:	Caratterizzante
Crediti/Valenza:	6
SSD attività didattica:	CHIM/02 - chimica fisica
Erogazione:	Tradizionale
Lingua:	Italiano
Frequenza:	Facoltativa
Tipologia esame:	Orale

PREREQUISITI

Italiano

Conoscere i rudimenti della struttura della materia, le proprietà e struttura dei materiali cristallini (piani cristallografici, indici di Miller). Conoscenze di chimica fisica di base.

English

Knowing the basis of matter structure, some basic properties connected to the chemical bonds. Some rudiments about crystalline materials (crystallographic planes and Miller index).

OBIETTIVI FORMATIVI

Italiano

Il Corso si propone di presentare in modo esaustivo ed approfondito le problematiche inerenti la struttura e la reattività dei materiali. In particolare verrà evidenziato come possono variare le proprietà in funzione del tipo di legame e della struttura. Verranno inoltre discusse le superficie, le interfacce e le loro relative stabilità, compresa la presenza di difetti.

English

The aim of the course is to present materials structure and reactivity. In particular the attention will be focused on oxides properties and how can they vary in correlation with the structure and the amount of defects (in the bulk or on the surface).

RISULTATI DELL'APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano

Conoscere la struttura dei materiali e le loro proprietà macroscopiche. Saper individuare ed interpretare il ruolo dei vari difetti di bulk e superficiali nella struttura di un materiale. Saper valutare i possibili effetti sulla struttura e reattività nei materiali a bassa dimensionalità.

English

To know material structures and their macroscopic properties. To be able to detect and to evaluate the defects

role in the bulk or on the surface of the material. To be able to evaluate different effects on structure and reactivity due to the nanosdimesions.

MODALITA' DI INSEGNAMENTO

Italiano

Tipologia Insegnamento

48 ore lezioni frontale

Frequenza

La frequenza alle lezioni non è obbligatoria ma fortemente consigliata.

English

48 hours lessons

Attendance to the lessons is not compulsory, but strongly recommended.

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano

Orale

Lo studente dovrà preparare una presentazione su un determinato materiale in cui dovrà presentare, nel modo più completo possibile, tutte le proprietà del materiale stesso. Durante l'esposizione domande pertinenti dei docenti valuteranno la preparazione complessiva.

English

Oral

The student is expected to prepare a power point presentation dealing with a specific material, describing in a comprehensive way its properties. Pertinent questions, during the presentation will evaluate the global preparation of the students.

PROGRAMMA

Italiano

Lezioni:

Introduzione allo stato solido, impacchettamenti, strutture cristalline, reticoli. Cenni sulla sintesi dei materiali inorganici, modelli di legame, struttura elettronica dei solidi, struttura e proprietà degli ossidi metallici, nanostrutture, superfici e interfacce, la non stechiometricità: i difetti. Proprietà ottiche e magnetiche

English

Introduction to the solid state. Crystalline structures, crystalline lattices, inorganic synthesis processes, bond models, electronic structures in solids structure and properties of metal oxides, Electronic classification of oxides: band structure. Non stoichiometry: the defects of the solids. Optical and magnetic properties.

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

Italiano

Il materiale didattico presentato a lezione è disponibile presso: Sito web del corso
É consigliato l'utilizzo del seguente materiale per approfondimenti e integrazioni:

West: Basic Solid state chemistry, Wiley

Callister: Fondamenti di Scienza e Ingegneria dei Materiali, Wiley

English

Slides will be available on the web site of the course

Raccomended texts:

West: Basic solid state chemistry, Wiley

Callister: Fondamenti di Scienza e Ingegneria dei materiali, Wiley

..

Pagina web del corso: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?_id=x5ha

COMPLESSI METALLICI (PER LA MEDICINA, AMBIENTE, ENERGIA)

Metal complexes (medicine, environment, energy)

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	CHI0052
Docente:	Prof. Roberto Gobetto (Titolare del corso) Prof. Eliano Diana (Titolare del corso)
Contatti docente:	+39 011-6707520, roberto.gobetto@unito.it
Anno:	1° anno
Tipologia:	Caratterizzante
Crediti/Valenza:	6
SSD attività didattica:	CHIM/03 - chimica generale e inorganica
Erogazione:	Tradizionale
Lingua:	Italiano
Frequenza:	Facoltativa
Tipologia esame:	Orale

OBIETTIVI FORMATIVI

italiano

Al termine del corso gli allievi dovranno conoscere le principali proprietà delle diverse classi di composti di coordinazione affrontate nel corso e come si organizzano in strutture tridimensionali complesse. dovranno inoltre essere in grado di identificare gli elementi metallici della tavola periodica che svolgono un ruolo in applicazioni energetiche, ambientali e mediche.

English

At the end of the course the students must know the main properties of the different classes of coordination compounds and their organization into tridimensional structures. Furthermore they will be able to identify the role of metal complexes in energy, environment and medical applications.

RISULTATI DELL'APPRENDIMENTO ATTESI

italiano

Dato un metallo, saperne descrivere le geometrie di coordinazione più tipiche, le tipologie di leganti affini secondo la teoria HSAB, le proprietà catalitiche e di reattività, l'eventuale ruolo biologico. Saper individuare le tecniche strumentali più adatte alla caratterizzazione di un complesso metallico, in relazione al tipo di metallo e di leganti. Date le principali tipologie di leganti chelanti e macrocicli sapere descrivere le architetture supramolecolari ottenibili e le interazioni metallo legante sottese. Sapere descrivere le principali tipologie di polimeri di coordinazione e stabilire la correlazione struttura-proprietà.

English

At the end of the course the student must demonstrate his skill in the description of the most typical coordination geometries, the different types of ligands according to HSAB theory, their catalytic and biological properties. The student must also demonstrate his skills on the choice of more appropriate instrumental methodologies employed

in order to fully characterize metal complexes. Furthermore, given the main types of chelate ligands and macrocycles, the student must be able to describe the obtainable supramolecular architecture and the metal-ligand interaction involved. Finally he must be able to describe the main typologies of coordination polymers and the correlation between structure and properties.

MODALITA' DI INSEGNAMENTO

italiano

Il corso è basato su lezioni frontali corredate di slides e nell'analisi critica di lavori specifici presenti nella letteratura scientifica

English

The course is based on classical frontal lecture and on critical analysis of papers published in current scientific literature

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

italiano

PROVA ORALE: lo studente preparerà e discuterà in aula una presentazione dove affronterà due tematiche a scelta di entrambe le parti del programma, corredata di bibliografia, in cui dovrà dimostrare di sapere effettuare un'analisi critica e personale degli argomenti esposti.

English

The students should prepare and discuss in classroom a presentation concerning two topics by choice from both the section of the program, supplied with bibliographi, and will demonstrate to face a critical and personal analysis of the exposed topics.

PROGRAMMA

italiano

Sistemi monometallici e polimetallici: nomenclatura, conto elettronico, sistemi saturi ed insaturi e loro reattività, correlazione struttura-proprietà, isolobalità; Interazione metallo-idrogeno: idruri classici, non classici, interazioni agostiche e non convenzionali: sintesi, proprietà spettroscopiche, reattività e catalisi; Carbeni di Fischer e di Schrock: sintesi, caratterizzazione e proprietà. Reattività e catalisi. Metatesi di olefine; Complessi carbonilici; Complessi metallici contenenti ammine, fosfine, leganti macrociclici. Applicazioni in campo catalitico: Fenomeni di luminescenza ed elettrochemiluminescenza mediante complessi dei metalli di transizione; Complessi metallici in campo biomedico

Chimica Supramolecolare

Concetti Fondamentali: riconoscimento molecolare e interazione host-guest; auto-assemblaggio e auto-organizzazione; cooperatività ed effetto chelato; preorganizzazione e complementarità; natura delle interazioni supramolecolari; effetto di solvatazione ed effetto idrofobico.

Applicazioni della chimica supramolecolare ai complessi metallici

Polimeri di coordinazione

Definizione di reticolo. Nomenclatura. Reticoli monodimensionali (1D), bidimensionali (2D) e tridimensionali (3D). Compensazione. Polimeri di coordinazione dei metalli di transizione: polimeri contenenti leganti CN-, N₃-, NCX (X=O, S, Se), nitrili, piridili. Proprietà dei polimeri di coordinazione: luminescenza, attività redox, conduttività, espansione termica negativa.

Complessi metallici con spin-crossover

Definizione di spin-crossover (SCO), spiegazione del fenomeno con la teoria del campo dei leganti. Aspetti termodinamici. Curve di transizione di spin. Effetto cooperativo. Meccanismo cooperativo nei complessi $[\text{FeL}_2(\text{NCS})_2]$. Sistemi SCO con leganti a ponte. Sistemi SCO polimerici.

Sistemi supramolecolari di complessi metallici in fase fluida: metallo-mesogeni

Cristalli liquidi. Fasi nematiche e lamellari. Proprietà mesomorfiche ed effetto della forma molecolare. Chiralità delle mesofasi. Molecole discotiche e mesofasi columnari. Metallomesogeni liotropici. Sistemi polimerici

English

Coordination compounds: nomenclature, electron counting, saturated and unsaturated systems and their reactivity, structure-property correlation, isolobality. Metal-hydrogen interaction: classical and non-classical hydrides, agostic interaction: synthesis, spectroscopic properties, reactivity and catalysis; Fischer Carbenes and Schrock Carbenes: synthesis, characterization and properties. Reactivity and catalysis. Olefin metathesis. Carbonyl complexes; Metal complexes containing amines, phosphines, macrocyclic ligands. Luminescence and electrochemiluminescence phenomena in transition metal complexes; Metal complexes in bio-medicine;

Supramolecular chemistry

Fundamental concepts: molecular recognition and interactions host-guests; self assembly and auto organization; cooperativity and chelate effect; preorganization and complementarity; nature of supramolecular interactions; solvation effect and hydrophobic effect.

Application of supramolecular chemistry to metal complexes

Coordination polymers

Networks. Nomenclature. Monodimensionali (1D), bidimensionali (2D) and tridimensionali (3D) networks. Penetration. Coordination polymers of transition metals: polymers with CN^- , N_3^- , NCX ($\text{X}=\text{O}, \text{S}, \text{Se}$), nitriles, pyridils. Properties of coordination polymers: luminescence, redox activity, conductivity, negative thermal expansion.

Spin-crossover metal complexes

Definition of spin-crossover (SCO), interpretation of SCO by means of ligand field theory. Thermodynamic of SCO. Curves of spin transition. Cooperative effect. Cooperative effect in $[\text{FeL}_2(\text{NCS})_2]$ complexes. SCO systems with bridging ligands. Polymeric SCO systems.

Supramolecular systems of metal complexes in fluid phase: metallomesogens

Liquid crystals. Nematic and lamellar phases. Mesomorphic properties and effect of molecular shape. Discotic molecules and columnar mesophases. Liotropic metallomesogens. Polymeric systems.

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

italiano

Dispense fornite dal docente (Diana)

Gispert - Coordination Chemistry (Wiley) Eischenbroich - Organometallics (Wiley)

J.P. Sauvage (ed.) - Transition metals in supramolecular chemistry (Wiley)

J.L. Serrano (ed.) Metallomesogens (wiley)

P. Gutlich, H.A. Goodwin (ed.) Spin crossover in transition metal compounds (topics in current chemistry 233) (Springer)

J.W. Steed, A.L. Atwood, Supramolecular Chemistry (Wiley)

Stuart R. Batten, Suzanne M. Neville and David R. Turner , Coordination Polymers (RSC Publishing)

English

Gispert - Coordination Chemistry (Wiley) Eischenbroich - Organometallics (Wiley)

J.P. Sauvage (ed.) - Transition metals in supramolecular chemistry (Wiley)

J.L. Serrano (ed.) Metallomesogens (wiley)

P. Gutlich, H.A. Goodwin (ed.) Spin crossover in transition metal compounds (topics in current chemistry 233)
(Springer)

J.W. Steed, A.L. Atwood, Supramolecular Chemistry (Wiley)

Stuart R. Batten, Suzanne M. Neville and David R. Turner , Coordination Polymers (RSC Publishing)

Pagina web del corso: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?_id=hzi2

ELETTROCHIMICA

Applied Eletrocatalysis

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	CHI0080
Docente:	Prof. Carlo Nervi (Titolare del corso)
Contatti docente:	0116707507, <i>carlo.nervi@unito.it</i>
Anno:	1° anno 2° anno
Tipologia:	A scelta dello studente
Crediti/Valenza:	4
SSD attività didattica:	CHIM/01 - chimica analitica CHIM/03 - chimica generale e inorganica
Erogazione:	Tradizionale
Lingua:	Italiano
Frequenza:	Obbligatoria
Tipologia esame:	Scritto

PREREQUISITI

Italiano

Fondamenti di termodinamica e cinetica chimica. Significato dei potenziali redox e fondamenti delle misure elettrochimiche. Nozioni di base di matematica.

English

Fundamentals of thermodynamics and chemical kinetics. Meaning of redox potentials and basics of electrochemical measurements. Basics of mathematics.

PROPEDEUTICO A

Italiano

Tesi

English

Thesis

OBIETTIVI FORMATIVI

Italiano

MODULO 1 (DANIELE)

Conoscenza dei fondamenti elettrochimici della corrosione dei metalli, partendo dalle teorie correnti sugli aspetti termodinamici e cinetici delle reazioni elettrodiche. Conoscenza dei meccanismi di corrosione e dei metodi per la prevenzione e per la protezione dei metalli dalla corrosione.

MODULO 2 (NERVI)

Lo scopo del corso è conoscere i principi dell'elettrochimica e delle tecniche elettrochimiche, ed applicarli alla produzione di energia (celle fotovoltaiche e fotocatalisi/fotosintesi artificiale, fuel cells), ed al suo stoccaggio (pile e accumulatori).

English

MODULE 1 (DANIELE)

The main objective is centered on the knowledge of the electrochemical bases of metallic material corrosion. Another objective is the knowledge of corrosion mechanisms and of the methods to shield metals from corrosion.

MODULE 2 (NERVI)

The aim of the course is to know the principles of electrochemistry and electrochemical techniques and apply them to the production of energy (photovoltaic cells and photocatalysis / artificial photosynthesis, fuel cells), and its storage (batteries and accumulators).

RISULTATI DELL'APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano

MODULO 1 (DANIELE)

Conoscenza degli aspetti termodinamici e cinetici dei processi corrosivi e dei principali meccanismi di corrosione. Conoscenza del comportamento dei principali materiali strutturali rispetto alla corrosione. Conoscenza delle principali modalità di intervento per la prevenzione e protezione dalla corrosione.

MODULO 2 (NERVI)

Conoscenze dell'elettrochimica e applicazioni nel campo della produzione (celle fotoelettrochimiche, fotosintesi artificiale, fuel cells) e stoccaggio di energia (pile e accumulatori).

English

MODULE 1 (DANIELE)

Knowledge of thermodynamics and kinetics of corrosion processes. Knowledge of the behaviour of principal structural materials against corrosion. Corrosion prevention and protection from.

MODULE 2 (NERVI)

Knowledge of electrochemistry and applications in the field of energy production (photoelectrochemical cells, artificial photosynthesis, fuel cells) and energy storage (batteries and accumulators).

MODALITA' DI INSEGNAMENTO

Italiano

In classe, con l'ausilio di strumenti per la didattica.

English

In the class, with the help of tools for teaching.

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano

Esame orale, con un esempio applicativo concreto (presentazione) potenzialmente utile al prosieguo della tesi

English

Oral examination, with a presentation on a practical example that could be useful for the thesis.

PROGRAMMA

Italiano

MODULO 1 (DANIELE)

Eq. di Butler-Volmer. Aspetti sperimentali ed applicativi delle relazioni di Tafel. Applicazioni allo studio della corrosione dei materiali metallici.

Modelli chimici che interpretano i fenomeni corrosivi. Aspetti stechiometrici, termodinamici e cinetici nell'interpretazione dei fenomeni di corrosione. La passivazione.

Fattori di corrosione relativi al materiale metallico e all'ambiente. La corrosione localizzata (contatto galvanico, per vaiolatura, in fessura, da stress, intergranulare, da erosione). Danneggiamento da idrogeno

Prevenzione e protezione: inibitori di corrosione; modificazioni superficiali; protezione catodica.

MODULO 2 (NERVI)

Richiami di base di elettrochimica. Trasporto di materia in soluzione e teoria dei processi elettrochimici. Tecniche elettrochimiche (Cronoamperometria, polarografia, voltammetria ciclica, onda quadra). Impiego della "Digital Simulation" (simulazione al calcolatore). Reazioni chimiche omogenee e associate, modifica del responso voltammetrico e studio di specie chimiche reattive all'elettrodo. Reversibilità/irreversibilità elettrochimica e chimica e meccanismi elettrochimici. Cenni alle tecniche basate sul concetto di impedenza. Applicazioni nel campo del risparmio energetico, sviluppo sostenibile e razionale sfruttamento delle risorse. Elettrochemiluminescenza (OLED), celle fotovoltaiche classiche e di terza generazione (DSSC), fotocatalisi e fotosintesi artificiale (produzione di idrogeno, riduzione della CO₂).

English

MODULE 1 (DANIELE)

Equation of Butler-Volmer for electrodic processes. Tafel equations for study of corrosion phenomena in metallic materials. Economic relevance of corrosion. Electrochemical model for interpretation of metal corrosion. Stoichiometry, thermodynamics and kinetics of corrosion processes. The great relevance of pit corrosion. Hydrogen embrittlement. Prevention and protection: passivation of metal surfaces; corrosion inhibitors; cathodic protection.

MODULE 2 (NERVI)

Review of basic electrochemistry. Transport of matter in solution and the theory of electrochemical processes. Electrochemical techniques (Chronoamperometry, polarography, cyclic voltammetry, square wave). Use of the "Digital Simulation" (computer simulation). Homogeneous chemical reactions, change of the voltammetric response and study of

reactive chemical species at the electrode. Electrochemical and chemical reversibility / irreversibility and electrochemical mechanisms. Outline of techniques based on the concept of impedance. Applications in the field of energy saving, sustainable development and rational exploitation of resources. Electrochemiluminescence (OLED), classical and thirdgeneration (DSSC) photovoltaic cells, photocatalysis and artificial photosynthesis (hydrogen production, reduction of CO₂). Equation of Butler-Volmer and current/potential curves. Relevance of Tafel's equations in the study of metal corrosion.

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

Italiano

MODULO 1 (DANIELE)

-P. Pedferri "Corrosione protezione dei materiali metallici" Città Studi Editore, Milano 2001

-Materiale didattico fornito dal docente.

MODULO 2 (NERVI)

Piero Zanello, Carlo Nervi, Fabrizia Fabrizi de Biani, "Inorganic Electrochemistry. Theory, Practice and Application", 2nd Ed., RSC, 2011, ISBN: 978-1-84973-071-6.

A.J. Bard, L. R. Faulkner, "Electrochemical Methods. Fundamentals and Applications", Wiley, New York.

A. E. Kaifer, M. Gómez-Kaifer, "Supramolecular Electrochemistry", Wiley-VCH, New York.

D. Astruc, "Electron Transfer and Radical Processes in Transition Metal Chemistry", Wiley-VCH, New York.

English

MODULE 1 (DANIELE)

P. Pedferri "Corrosione protezione dei materiali metallici" Città Studi Editore, Milano 2001

Educational materials provided by the teacher.

MODULE 2 (NERVI)

Piero Zanello, Carlo Nervi, Fabrizia Fabrizi de Biani, "Inorganic Electrochemistry. Theory, Practice and Application", 2nd Ed., RSC, 2011, ISBN: 978-1-84973-071-6.

A.J. Bard, L. R. Faulkner, "Electrochemical Methods. Fundamentals and Applications", Wiley, New York.

A. E. Kaifer, M. Gómez-Kaifer, "Supramolecular Electrochemistry", Wiley-VCH, New York.

D. Astruc, "Electron Transfer and Radical Processes in Transition Metal Chemistry", Wiley-VCH, New York.

IDENTIFICAZIONE DI COMPOSTI ORGANICI

Identification of organic compounds

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	CHI0085
Docente:	Dott. Annamaria Deagostino (Titolare del corso) Dott. Stefano Dughera (Titolare del corso)
Contatti docente:	0116707647, annamaria.deagostino@unito.it
Anno:	2° anno
Tipologia:	A scelta dello studente
Crediti/Valenza:	4
SSD attività didattica:	CHIM/06 - chimica organica
Erogazione:	Tradizionale
Lingua:	Italiano
Frequenza:	Facoltativa
Tipologia esame:	Scritto con orale a seguire

PREREQUISITI

Italiano

Chimica organica I e II, nozioni di base di spettroscopia di risonanza magnetico nucleare, spettrometria di massa e spettroscopia infrarossa.

English

Mass spectrometry: basics; ionization methods; mass analyzers; interpretation of EI mass spectra: identification of the molecular ion, molecular formula determination, fragmentation; mass spectra of the main classes of organic molecules Proton NMR spectroscopy: review of basic notions; (Pople notation, AMX, ABX, ABC systems, vicinal and geminal coupling constant analysis, Karplus correlation) Application of Karplus correlation to cyclic structures Coupling of proton nuclei with another important nuclei (^{19}F , ^{31}P , ^{29}Si) Spin selective decoupling Chirality. ^{13}C NMR spectroscopy: Peak intensity Equivalence of chemical shifts Chemical shift of chemical classes (substituent effect) ^{13}C - ^1H spin coupling; ^{13}C quantitative analysis; DEPT. NMR Correlation Spectrometry COSY (CORrelation Spectroscopy) HETCOR (HETeronuclear CORrelation) HMQC (Heteronuclear Multiple Quantum Correlation) Ipsenol structure resolution ROESY Field gradient in NMR Notions of NMR spectrometry of another important nuclei with spin $\frac{1}{2}$ Interpretation of spectra of known and unknown organic molecules Notions of circular dichroism applied to organic molecules (Dr. Elena Ghibaudi)

OBIETTIVI FORMATIVI

Italiano

Alla fine del corso, lo studente dovrà essere in grado di risolvere la struttura incognita di una molecola organica di media complessità attraverso le diverse tecniche NMR e di spettrometria di massa.

English

The student should recognize the structure of an unknown organic molecule by the use of the NMR and mass spectrometry techniques described in the course

RISULTATI DELL'APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano

Il corso si propone di illustrare le tecniche fondamentali della diagnostica molecolare (spettrometria di massa, spettrometria nell'infrarosso, spettroscopie di risonanza magnetica nucleare mono e bidimensionali) allo scopo di determinare la struttura di molecole organiche anche complesse.

English

This course has the goal of describing the main techniques useful to the organic chemist in order to determine the structure of an unknown organic molecule.

MODALITA' DI INSEGNAMENTO

Italiano

Il corso si svolge in aula attraverso lezioni teoriche ed esercitazioni.

English

Only frontal lectures.

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano

Lo studente deve risolvere una struttura incognita di una molecola organica di media difficoltà attraverso l'analisi di spettri NMR (protonico, carbonio 13, DEPT e COSY), spettro di massa e IR, attraverso una relazione scritta che sarà seguita da un breve colloquio atto ad accertare le conoscenze dello studente delle tecniche spettroscopiche viste e facenti parte del programma.

English

The final test will consist in a written report where the student must analyse the protonic, ¹³C, DEPT and COSY NMR, mass, IR spectra of an unknown organic compound in order to recognize it. This will be followed by a brief oral exam concerning the main NMR and Mass spectrometry techniques described during the course and included in the program.

ATTIVITÀ DI SUPPORTO

Pre-requisiti (in ingresso)	Insegnamenti fornitori
Conoscenze di base di Chimica Organica	Chimica Organica A,B,C,D,E,F (CH)
	Sintesi e meccanismi in Chimica Organica(MCA)
Conoscenze di base di Spettroscopia NMR, IR e di Massa	Chimica Organica F (CH); Spettroscopie magnetiche ed ottiche (MCA)
Competenze minime (in uscita)	Insegnamenti fruitori
Riconoscere la struttura di una molecola organica analizzandone gli spettri NMR, IR e di massa.	

PROGRAMMA

Italiano

Spettrometria di massa:

richiamo di nozioni di base e teoria; metodi di ionizzazione; analizzatori di massa; interpretazione degli spettri di massa EI: riconoscimento dello ione molecolare, determinazione di una formula molecolare, frammentazione; spettri di massa delle principali classi di molecole organiche.

Spettroscopia nell'infrarosso:

interpretazione degli spettri; assorbimenti caratteristici dei gruppi funzionali delle molecole organiche.

Spettroscopia NMR protonica:

richiamo di nozioni di base; accoppiamento e sistemi di spin; accoppiamento di protoni con altri nuclei; accoppiamento a lunga distanza; disaccoppiamento di spin; effetto nucleare overhauser (NOE) e spettroscopia per differenza e prossimità.

Spettroscopia NMR del ^{13}C :

richiamo di nozioni di base e teoria; tecniche di diasaccoppiamento ^1H ; scala e intervallo degli spostamenti chimici; effetto NOE; accoppiamento di spin ^{13}C - ^1H ; interpretazione degli spettri ^{13}C di molecole organiche; DEPT.

Spettroscopia NMR di correlazione; NMR bidimensionale:

nozioni di base e teoria; correlazione ^1H - ^1H : COSY, NOESY e ROESY; correlazione ^{13}C - ^1H : diretta e long range con tecniche dirette e inverse; cenni su altre tecniche di correlazione.

Spettroscopia NMR di altri nuclei aventi spin $\frac{1}{2}$.

Interpretazione di spettri di molecole organiche di struttura nota e non nota.

English

Mass spectrometry:

basics; ionization methods; mass analyzers; interpretation of EI mass spectra: identification of the molecular ion, molecular formula determination, fragmentation; mass spectra of the main classes of organic molecules

Proton NMR spectroscopy:

review of basic notions; (Pople notation, AMX, ABX, ABC systems, vicinal and geminal coupling constant analysis, Karplus correlation)

Application of Karplus correlation to cyclic structures

Coupling of proton nuclei with another important nuclei (^{19}F , ^{31}P , ^{29}Si)

Spin selective decoupling

Chirality.

^{13}C NMR spectroscopy:

Peak intensity

Equivalence of chemical shifts

Chemical shift of chemical classes (substituent effect)

^{13}C - ^1H spin coupling;

^{13}C quantitative analysis;

DEPT.

NMR Correlation Spectrometry

COSY (COrrrelation Spectroscopy)

HETCOR (HETeronuclear COrrrelation)

HMQC (Heteronuclear Multiple Quantum Correlation)

Ipsenol structure resolution

ROESY

Field gradient in NMR

Notions of NMR spectrometry of another important nuclei with spin $\frac{1}{2}$

Interpretation of spectra of known and unknown organic molecules

Notions of circular dichroism applied to organic molecules (Dr. Elena Ghibaudi)

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

Italiano

Il materiale didattico presentato a lezione è disponibile presso: <http://lmchimica.campusnet.unito.it>

I testi base consigliati per il corso sono:

R.M. Silverstein; F.X.Webster- Identificazione spettroscopica di composti organici- Casa Editrice Ambrosiana
M.Hesse; H.Meier; B.Zeeh- Metodi Spettroscopici nella Chimica Organica- Edises

English

All the slides shown during the lectures will be available in <http://lmchimica.campusnet.unito.it> site.

The following books are recommended

R.M. Silverstein; F.X.Webster- Identificazione spettroscopica di composti organici- Casa Editrice Ambrosiana
M.Hesse; H.Meier; B.Zeeh- Metodi Spettroscopici nella Chimica Organica- Edises

Pagina web del corso: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?_id=k88c

MATERIALI POLIMERICI

Polymeric Materials

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	CHI0059
Docente:	Dott. Valentina Brunella (Titolare del corso)
Contatti docente:	011 6707546, valentina.brunella@unito.it
Anno:	1° anno 2° anno
Tipologia:	Di base
Crediti/Valenza:	6
SSD attività didattica:	CHIM/04 - chimica industriale
Erogazione:	Tradizionale
Lingua:	Italiano
Frequenza:	Obbligatoria
Tipologia esame:	Orale

PREREQUISITI

Lo studente deve possedere delle basi di chimica macromolecolare: struttura chimiche delle unità strutturali dei principali polimeri e temperature caratteristiche dei sistemi polimerici

OBIETTIVI FORMATIVI

Italiano

In accordo con gli obiettivi formativi del Corso di Studi che prevedono una formazione di livello avanzato per l'esercizio di attività volte all'innovazione, l'insegnamento si propone di: -fornire le principali relazioni proprietà/struttura dei sistemi polimerici, -descrivere i vantaggi e svantaggi nell'utilizzo dei materiali polimerici, -descrivere le principali applicazioni dei materiali polimerici e -fornire le basi per interpretare i dati sperimentali ottenuti con diverse tecniche di laboratorio. Inoltre, l'obiettivo è di avvicinare gli studenti al mondo tecnologico ed innovativo dei polimeri.

English

According to the master course objectives related to advanced level training for the pursuit of activities aimed to innovation, teaching aims are: -knowing polymer structure-properties relationship, -describe advantages and disadvantages of polymers, -describe the main applications of polymeric materials, -develop the bases of interpreting experimental data obtained by laboratory techniques. In addition, the goal is to bring students closer to the technological and innovative world of polymers.

RISULTATI DELL'APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano

Al termine del corso lo studente sarà in grado di conoscere gli aspetti teorici e pratici delle principali tecniche di indagine per materiali polimerici, conoscerà i principali meccanismi di degradazione e stabilizzazione delle sostanze polimeriche e sarà in grado di risolvere semplici problematiche industriali.

English

At the end of the course students are expected to be able to handle the main polymer experimental technique, to deal with the degradation and stabilization processes and to solve simple industrial problems.

MODALITA' DI INSEGNAMENTO

Italiano

Il corso si articola in 32 ore di lezioni frontali e 16 ore di laboratorio sperimentale e 12 ore di esercitazioni. Sono, inoltre, previsti seminari di esperti del mondo industriale per avvicinare lo studente alle realtà aziendali.

English

The course consists of 32 hours of lectures and 16 hours of experimental laboratory and 12 hours of exercises. Besides, there will be talks by experts from industry to bring students to companies.

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano

La verifica dell'apprendimento prevede: una relazione sulle esercitazioni ed una prova orale sugli argomenti oggetto delle lezioni.

La relazione riguarda l'interpretazione e il commento di spettri FTIR, termogrammi TGA e DSC, pirogrammi e dati viscosimetrici di alcuni materiali polimerici comunemente usati.

La prova orale consiste in un colloquio basato su:

- l'esposizione di argomenti trattati nel corso
- domande utili per valutare il ragionamento dello studente sui problemi reali;

La prova orale viene valutata in trentesimi e farà media con il voto della relazione di laboratorio: in particolare il voto di tale relazione verrà considerato pesato ad 1/3 rispetto alla prova orale.

English

The examination consists of an exercises report and an oral interview on topics covered. The exercises report deals with the interpretation of FTIR spectra, DSC and TGA thermograms, pyrolyses results and viscosimetric data. The data obtained in the laboratory, and ranked thirty. The oral test consists of an interview about:

- exposure of topics covered
 - questions useful to evaluate student's skills to polymeric problem solving
- The oral exam is evaluated thirty and will average with the vote of the report: in particular, the vote of the report will be considered weighed to 1/3 compared to the oral test.

PROGRAMMA

Italiano

Richiamo sulle proprietà fisiche e chimiche dei sistemi polimerici termoplastici e termoindurenti

Principali applicazioni dei polimeri come materiali solidi e come materiali liquidi

Tecniche di caratterizzazione semplice (densità, solubilità, resistenza meccanica, fumi)

Valutazione dei pesi molecolari e loro distribuzioni tramite viscosimetria e cromatografia di esclusione sterica

Transizioni termiche (transizioni vetrose, fusioni e cristallizzazioni)

Degradazione termica e termossidativa e stabilizzazione. Accenni ai processi di riciclo dei materiali polimerici.

Tecniche analitiche di analisi termica (calorimetria differenziale a scansione e termo gravimetria)

Pirolisi GC-MS di sistemi polimerici

Spettroscopia infrarossa e sue applicazioni a polimeri

Microscopia ottica, elettronica (SEM, TEM) e a forza atomica (AFM)

Determinazione delle proprietà meccaniche (statiche e dinamiche)

English

Survey of chemical and physical properties of main thermoplastic and thermosetting polymer systems.

Main applications of polymers as solid materials and liquid materials

Simple characterization techniques (density, solubility, mechanical strength, smoke)

Molecular weights and their distributions by viscometry and size exclusion chromatography

Thermal transitions (glass transitions, melting and crystallization)

Thermal degradation in presence or not of oxygen and stabilization of the materials. A sketch of the recycling processes of polymeric materials.

Analytical techniques of thermal analysis (differential scanning calorimetry and thermo gravimetry)

Pyrolysis GC-MS of polymeric systems

Infrared spectroscopy and its applications to polymers

Optical microscopy, electronic (SEM, TEM) and atomic force (AFM) microscopy

Mechanical properties of polymeric materials and their determination (static and dynamic)

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

Italiano

I testi base consigliati per il corso sono:

- S. Bruchner, G. Allegra, M. Pegoraro, F.P. La Mantia, "Scienza e tecnologia dei materiali polimerici" ed. Edises, Napoli (2002) (cap. 3, 4, 6).
- M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh, „Metodi spettroscopici nella chimica organica", ed Edises, Napoli (1996)

E' consigliato l'utilizzo del seguente materiale per approfondimenti e integrazioni:

- Hummel, Scholl, "Atlas of Polymer and Plastics Analysis", Carl Hanser Verlag, Vienna (1981)
- E. A. Turi, "Thermal characterization of polymeric materials" second edition, Academic Press, San Diego (1997)

Infine sono di seguito indicati siti internet di interesse:

<http://www.polial.polito.it/cdc/macrog/index.html>

English

The basic texts recommended for the course are:

- S. Bruchner, G. Allegra, M. Pegoraro, F.P. La Mantia, "Science and technology of polymeric materials" and. Edises, Naples (2002) (Ch. 3, 4, 6).
 - M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh, "Spectroscopic methods in organic chemistry", and Edises, Naples (1996)
- And 'it recommended the use of the following material for insights and additions:
- Hummel, Scholl, "Atlas of Polymer and Plastics Analysis", Carl Hanser Verlag, Vienna (1981)
 - EA Turi, "Thermal characterization of polymeric materials" second edition, Academic Press, San Diego (1997)

Finally are listed below websites of interest

<http://www.polial.polito.it/cdc/macrog/index.html>

Pagina web del corso: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?_id=eiks

METODOLOGIE DI SINTESI E SVILUPPO FARMACEUTICO

Synthesis and Development Methodologies

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	CHI0105
Docente:	Dott. Marco LOLLI (Titolare del corso)
Contatti docente:	0116707180, marco.lolli@unito.it
Anno:	1° anno
Tipologia:	Di base
Crediti/Valenza:	6
SSD attività didattica:	CHIM/08 - chimica farmaceutica
Erogazione:	Tradizionale
Lingua:	Italiano
Frequenza:	Obbligatoria
Tipologia esame:	Scritto più orale obbligatorio

PREREQUISITI

Buone conoscenze di chimica organica e di metodologie di sintesi avanzata.

OBIETTIVI FORMATIVI

ITALIANO

L'insegnamento si propone di fornire a uno studente della LM in Chimica le basi per una sua futura collocazione professionale Ricerca/Sviluppo in ambito Farmaceutico (Drug Design/Development). Mantenendo la molecola organica come punto centrale dell'insegnamento, lo studente sarà gradualmente introdotto al linguaggio e alle metodologie che un chimico utilizza nell'affrontare le varie problematiche in cui è coinvolto in ambito farmaceutico.

Partendo da un'introduzione ai principi generali della Chimica Farmaceutica (Medicinal Chemistry), il corso approfondirà due temi generali: Sintesi Farmaceutica (adattamento delle metodologie di sintesi avanzata all'ambito farmaceutico) e Sviluppo Farmaceutico (tecniche di ottimizzazione del processo sintetico portandolo dal laboratorio all' impianto pilota).

ENGLISH

The course aims to provide a student of Chemistry LM basis for his future professional placement in Research / Development within of Drug Design / Development areas. Maintaining the organic molecule as the central point of the course, students will be gradually introduced to the language and methodologies that a Chemist used in addressing the various issues that are involved in the pharmaceutical field.

Starting with an introduction to the general principles of Medicinal Chemistry, the course will explore two general themes: Pharmaceutical Synthesis (adaptation of synthesis methods advanced scope pharmaceutical) and Pharmaceutical Development (technical optimization of the synthetic process by bringing the lab to pilot plant then to large scale production).

RISULTATI DELL'APPRENDIMENTO ATTESI

ITALIANO

Al termine dell'insegnamento, lo studente dovrà dimostrare di essere in grado di applicare i principi fondamentali della Chimica Farmaceutica al design di molecole bioattive. Lo studente dovrà essere inizialmente in grado di

giudicare la possibilità che una molecola organica possa considerarsi un potenziale farmaco (profilo drug-like) prevedendo la presenza di eventuali debolezze (solubilità, biodisponibilità, stabilità metabolica, ...). La molecola bersaglio dovrà essere quindi trattata in termini di sintesi farmaceutica e quindi di sviluppo farmaceutico, passi fondamentali per portare una struttura bersaglio dalla cappa del Chimico fino alla sua produzione in ampia scala.

ENGLISH

At the end of the course, students will have to prove the acquisition of knowledge of the principles of Medicinal Chemistry in the design of bioactive molecules. The student will initially be able to judge the possibility that an organic molecule can be considered as a potential drug (drug-like profile) providing for possible weaknesses (solubility, bioavailability, metabolic stability, ...). The target molecule will then be treated in terms of pharmaceutical synthesis and then pharmaceutical development, basic steps to bring a target structure from the hood of Chemical until its production in large scale.

MODALITA' DI INSEGNAMENTO

ITALIANO

Didattica frontale con slide e materiale multimediale.

ENGLISH

Lectures with slides and multimedia material.

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

ITALIANO

L'esame consiste in una prima prova, scritta, il cui superamento permette l'accesso a una seconda prova, questa volta orale. Nella determinazione del voto finale viene tenuto conto di entrambe le prove.

Prova scritta. Allo studente è fornito un dettagliato profilo descrittivo riferito a una struttura organica incognita. La struttura è descritta per le sue proprietà chimico-fisiche, (solubilità, logP, ...), per profilo druglike quindi per reattività, debolezze strutturali e possibile metabolismo. Lo studente è chiamato a scegliere fra 20 possibili strutture la struttura che risponde al profilo fornito, motivando le proprie decisioni.

Prova orale. Circa 48 ore prima dell' esame, lo studente riceve un articolo di recente pubblicazione in campo MedChem. Simulando un group meeting in ambito di Ricerca, lo studente preparerà la presentazione orale in PowerPoint di 10 min durante la quale descriverà alcune molecole presentate nel lavoro. Durante la presentazione, tali molecole saranno dettagliatamente discusse secondo le tematiche del Corso e forniranno occasioni per nuovi spunti di discussione (10 min).

ENGLISH

The final examination consists of a first test, written-test, which allows the access to a second test, this time oral. In determining the final grade is given by both tests.

Written test. The student is provided a detailed descriptive profile refers to an organic structure unknown. The structure is described for its physical-chemical properties (solubility, logP, ...), for profile druglike then for reactivity, structural weaknesses and possible metabolism. The student is asked to choose among 20 possible structures the candidate able to responds to the profile provided, giving reasons for its decisions.

Oral examination. About 48 hours before the oral examination, the student receives an article recently published in the field medchem. Simulating a group meeting in the area of search, the student will prepare the oral presentation in PowerPoint 10 min during which describe molecules presented in the work. During the presentation, such molecules will be discussed in detail under the themes of the course and will provide opportunities to explore new

areas for discussion (10 min).

PROGRAMMA

ITALIANO

1) The Modern Drug Discovery Process. Nella parte iniziale dell'insegnamento sarà descritta nel dettaglio la serie di passaggi che vengono seguiti nel moderno Drug Design per portare una molecola ad attività in vitro fino alla commercializzazione sul mercato quale nuovo Farmaco. La conoscenza delle varie fasi servirà successivamente per approfondire le singole problematiche e legarle alla struttura molecolare, soggetto dell'insegnamento.

2) Correlation between structural features and chemophysical properties: a trip through the body. Focalizzandosi quindi sulla struttura molecolare, in questo momento saranno approfondite le correlazioni fra scaffold molecolare (gruppi funzionali) e il profilo chimico fisico. L'obiettivo è rendere lo studente in grado di discutere la correlazione di descrittori molecolari quali solubilità, log P, pKa con le caratteristiche strutturali. La struttura verrà quindi descritta in termini di reattività/debolezze strutturali. Questa fase, prettamente chimica, sarà fondamentale per poter poi muovere gli stessi concetti a livello biologico. Qui le capacità della struttura molecolare di interagire con il suo intorno determineranno la sua vita nel sistema biologico. Il candidato Farmaco dovrà quindi essere ottimizzato per ogni fase della sua vita, dalla somministrazione, all'arrivo sul sito bersaglio quindi alla generazione dell'effetto farmacologico e poi all'escrezione (Metabolismo). In questa fase verranno anche citate nozioni di base di Tecnica Farmaceutica.

Keywords: Polarity, Lipophilicity, Dielectric constant, Solubility, mp, bp, Chromatographic elution, TLC, pKa, LogP, Reactivity, Adsorption, Distribution, Pharmacodynamics, Pharmacokinetics, Metabolism, Elimination, Druggability, Rule of five (Ro5).

3) The Drug Discovery process: the role of an Organic Chemist. Come si colloca un Chimico Organico in un processo di Drug Discovery? Quali problematiche specifiche viene chiamato a risolvere? In questa fase si cercherà di rispondere a queste due domande introducendo il concetto di Pharmaceutical synthesis, un'ideale branca della sintesi organica che accorpa tutte le metodologie atte ad accelerare il processo sintetico muovendolo ad ampi numeri. Partendo da esempi di sintesi totali fondamentali (Chinina, Taxol) saranno introdotti i concetti di Hit-to-Lead optimization, Combinatorial Chemistry, Parallel synthesis, Click chemistry, Solid phase synthesis, Scavenging reagents e Flow Chemistry.

Case study: Discovery of antimalarial drugs: from Quinine to Artemisinin and beyond.

Case study: Cytotoxic Drugs: the total synthesis of Taxol (Paclitaxel).

Keywords: Literature search, Patent search, Drug target, Chemical Space, Druggability, ADMET, SAR, molecular structure and diversity, lead discovery, Hit identification, virtual screening, blind screening, natural sources, Hit-to-Lead optimization processes, traditional methods, bioisosterism, Scaffold hopping.

4) From Research to Development: the role of an Organic Chemist. Una struttura molecolare dopo essere stata ottimizzata per attività, tossicità e ADME si trova a subire ancora un ultimo, fondamentale, passaggio prima di poter arrivare sul mercato. In questo ultimo capitolo viene descritto il cosiddetto Sviluppo (Development) il passaggio che porta la metodologia sintetica sviluppata per bassa scala (all'interno del grammo) ad essere condotta su scala Pilota prima e poi su impianto vero e proprio. A chiusura del capitolo verranno trattati anche aspetti normativi.

Case study: From Bench to Market: the Iopamidol's Bracco experience.

Keywords: From Bench to Plant, the role of the Green Chemistry, regulatory issues, Good Practices, Impurities, Generic Drugs and Patents.

ENGLISH

1) The Modern Drug Discovery Process. In the initial part the course, it will be described in detail the steps that are followed in the modern drug design to bring a molecule with in vitro activity to commercialization on the market as a

new drug. The knowledge of the various phases will be the entry-level knowledge necessary for a deeper treatment of each individual topic.

2) Correlation between structural features and chemiophysical properties: a trip through the body. Focusing on the molecular structure, at first will be explored the correlations between molecular scaffold (functional groups) and a physical-chemical properties. The goal will be to make students able to discuss the correlation of molecular descriptors such as solubility, log P, pKa with structural features. The molecular structure is then described in terms of reactivity / structural weaknesses. This phase, where a lot of chemistry is involved, will be crucial in the further step, when the same concepts are moved at biological level. The ability of the molecular structure to interact with its surroundings will determine his life in the biological system. The candidate drug will then be optimized for each phase of his life, from the administration, the arrival on the target site then the generation of the pharmacological response and then excretion (Metabolism). In this phase we will be also mentioned basics of Pharmaceutical Technology.

Keywords: Polarity, Lipophilicity, Dielectric constant, Solubility, mp, bp, Chromatographic elution, TLC, pKa, LogP, Reactivity. Adsorption, Distribution, Pharmacodynamics, Pharmacokinetics, Metabolism, Elimination. Druggability, Rule of five (Ro5).

3) The Drug Discovery process: the role of an Organic Chemist. How can an Organic Chemistry professional figure can be involved in a Drug Discovery process? What specific problems he/she is called to solve? In this phase, we will try to answer these two questions by introducing the concept of Pharmaceutical synthesis, an ideal branch of organic synthesis that brings together all methods designed to speed up the process by moving to large numbers synthetic. Starting with examples of total syntheses fundamental (Quinine, Taxol) will be introduced to the concepts of:

Hit-to-Lead optimization, Combinatorial Chemistry, Parallel synthesis, Click chemistry, Solid phase synthesis, Scavenging reagents e Flow Chemistry.

Case study: &n bsp; Discovery of antimalarial drugs: from Quinine to Artemisinin and beyond.

Case study: &n bsp; Cytotoxic Drugs: the total synthesis of Taxol (Paclitaxel).

Keywords: Literature search, Patent search, Drug target, Chemical Space, Druggability, ADMET, SAR, molecular structure and diversity, lead discovery, Hit identification, virtual screening, blind screening, natural sources, Hit-to-Lead optimization processes, traditional methods, bioisosterism, Scaffold hopping.

4) From Research to Development: the role of an Organic Chemist. A molecular structure, after being optimized in terms of activity, toxicity and ADME, has to undergo one last, crucial step before it can reach the Market. In this last chapter describes the so-called Development, the passage that carry the synthetic methodology, developed for low-scale (inside the gram scale), to be conducted on scale Pilot first and then on the large scale production. At the end of the chapter, also regulatory issues will be discussed.

Case study: &n bsp; From Bench to Market: the loperamide's Bracco experience.

Keywords: From Bench to Plant, the role of the Green Chemistry, regulatory issues, Good Practices, Impurities, Generic Drugs and Patents.

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

ITALIANO

2014 - Stevens - The Modern Drug Discovery Process

2014 - Ghosh - Structure-based Design of Drugs and Other Bioactive Molecules

2013 - Corey - Drug Discovery, Practices, Processes, and Perspectives

2002 - Wermut - The Practice Of Medicinal Chemistry

2001 - Smith - Pharmacokinetics And Metabolism In Drug Design

ENGLISH

2014 - Stevens - The Modern Drug Discovery Process

2014 - Ghosh - Structure-based Design of Drugs and Other Bioactive Molecules

2013 - Corey - Drug Discovery, Practices, Processes, and Perspectives

2002 - Wermut - The Practice Of Medicinal Chemistry

2001 - Smith - Pharmacokinetics And Metabolism In Drug Design

NOTA

ITALIANO

Modalità di insegnamento: 6CFU/ 48 ore di lezione frontali a frequenza obbligatoria

Pagina web del corso: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?_id=0a07;sort=DEFAULT;search=;hits=23

ENGLISH

Teaching mode: 6CFU / 48 class hours in front compulsory attendance

Course web page: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?_id=0a07;sort=DEFAULT;search=;hits=23

Pagina web del corso: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?_id=0a07

MODELLISTICA DEI SOLIDI

SOLID STATE MODELING AND SIMULATION

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	CHI0067
Docente:	Dott. Silvia Casassa (Titolare del corso)
Contatti docente:	0116707829, silvia.casassa@unito.it
Anno:	2° anno
Tipologia:	A scelta dello studente
Crediti/Valenza:	4
SSD attività didattica:	CHIM/02 - chimica fisica
Erogazione:	Tradizionale
Lingua:	Inglese
Frequenza:	Obbligatoria
Tipologia esame:	Orale

PREREQUISITI

Conoscenze di base di: (i) postulati della meccanica quantistica; (ii) chimica dello stato solido (bande elettroniche, fononiche, gap, etc.); (iii) strutturistica chimica (reticoli cristallini, gruppi di simmetria, reticolo reciproco); (iv) metodi quanto-meccanici per la soluzione dell'equazione di Schroedinger per sistemi molecolari. Ciascuno di questi argomenti verrà ripreso all'inizio dell'insegnamento in modo da uniformare i vari linguaggi e fornire una solida base di partenza comune sulla quale innestare le successive conoscenze.

OBIETTIVI FORMATIVI

Italiano

L'insegnamento si propone di fornire a studenti e studentesse un approfondimento sulle teorie e i metodi della chimica quantistica per lo studio dei sistemi macroscopici quali cristalli, superfici, interfacce, polimeri e nanostrutture.

In particolare, si intende evidenziare la profonda connessione tra strutture matematiche, equazioni fisiche e proprietà intrinseche della materia che è ciò che consente di ottenere, attraverso lo sviluppo di codici quanto-meccanici, l'energia di un solido ma anche la sua struttura elettronica e vibrazionale e le sue proprietà di risposta a sollecitazioni esterne, quali campi elettrici o stress meccanici.

Infine, l'insegnamento punta a sviluppare negli studenti/esse:

- un certo grado di autonomia rispetto ad una eventuale scelta e all'utilizzo di software computazionali per lo studio delle proprietà dei materiali,
- una buona consapevolezza dei limiti di applicabilità e dei punti di forza di ciascuno metodo computazionale
- una capacità di analisi dei risultati ottenuti attraverso il calcolo, del loro range di applicabilità e di come confrontarli con eventuali dati sperimentali.

English

Aims and objectives.

The aim of the tuition is to provide students with a general overview and basic knowledges of the quantum-chemistry methods as applied to the study of the structure and properties of the solid state materials, as crystals, surfaces, interfaces, polymers and nanostructures.

In particular, the teaching is intended to emphasize the deep connection between mathematical algorithms, physical equations and the intrinsic properties of matter and then how, through the development of quantum-mechanical code, it is possible to get the energy of systems but also their electronic and vibrational structure and their response properties to any external solicitation as an electric field or a strain stress.

Moreover, students should develop a good degree of autonomy in:

- the possible choice and use of a quantum-mechanical scientific program to deal with the study of solid state materials,
- the analysis, definition of the applicability range and comparison with experimental data of the computed results.

RISULTATI DELL'APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano

Al termine dell'insegnamento, studenti e studentesse dovrebbero essere in grado di utilizzare il formalismo matematico, le conoscenze sulla struttura chimico-fisica della materia e gli algoritmi per la soluzione dell'equazione di Schroedinger, nelle sue varie approssimazioni, nello studio teorico delle proprietà dei solidi cristallini.

La possibilità di calcolare attraverso l'utilizzo consapevole di un software scientifico di alto livello quelle osservabili generalmente ottenute attraverso esperimenti, darà loro l'opportunità di cogliere il profondo nesso tra teoria e realtà fisica. Inoltre saranno in grado di apprezzare la sinergia tra chimica teorica e chimica sperimentale e utilizzare i dati calcolati, presenti in articoli scientifici e libri, con cognizione di causa.

English

Learning outcomes

As a result, students should be able to manage the mathematical formalism, knowledges on the chemical-physical structure of matter and the algorithms to solve the many Schroedinger equations in the theoretical study of the solid state systems.

The possibility to numerically evaluate, through a scientific reliable software, that properties usually obtained experimentally, should give students the opportunity to fully appreciate the deep link between theory and physical reality. Moreover, students will experience the synergy between experimental and theoretical chemistry, that more and more characterizes any field of scientific investigation, and they should better understand the role and range of validity of the computed data, as reported in literature or calculated by themselves.

MODALITA' DI INSEGNAMENTO

Italiano

Due sono le modalità di insegnamento:

la prima parte dell'insegnamento, durante la quale vengono forniti concetti e strumenti, è di tipo frontale, in aula, con l'ausilio della lavagna di ardesia e l'utilizzo di lucidi;

la seconda parte, che si svolge in laboratorio informatico, prevede l'uso attivo di personal computer, uno per ciascun studente/essa.

English

Teaching Methods

Two different methods are exploited:

In the first part of the tuition, during which concepts and tools are introduced and explained, traditional lectures are provided with the aid of the blackboard and projected slides.

Then, in the computer room, where one PC is available for each student, the interaction becomes more narrower and individual.

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano

L'esame consiste in un colloquio orale, della durata di circa quaranta minuti, durante il quale vengono accertati i risultati dello studio, attraverso domande di teoria generale e proponendo semplici esercizi, volti a comprendere quanto i concetti siano stati assimilati.

Inoltre, facendo riferimento al lavoro svolto in laboratorio informatico, verranno poste domande sui risultati ottenuti in modo da verificare il grado di autonomia e consapevolezza raggiunto nell'uso del software scientifico e nell'analisi dei dati.

English

The exam is a one-hour interview aim at assessing the degree of understanding of the subject, through general questions and problems. Moreover, by referring to the work done during the tutorial session, some questions on the adopted software and on the results will be asked.

ATTIVITÀ DI SUPPORTO

Italiano

L'Insegnamento frontale è completato dallo svolgimento di un laboratorio informatico, con disponibilità di un personal computer per ogni studente/essa, equipaggiato con sistema operativo Linux e il codice quanto-meccanico CRYSTAL (www.crystal.unito.it).

English

Lectures are supported by a short stage in the computer laboratory, where PC, equipped with Linux system operator, will be used to run the ab initio quantum-mechanical public code CRYSTAL (www.crystal.unito.it).

PROGRAMMA

Italiano

Una funzione d'onda per descrivere atomi, molecole e cristalli.

Una funzione d'onda come densità di probabilità: riepilogo dei postulati della meccanica quantistica (QM), secondo l'interpretazione di Copenaghen.

Equazioni di Schroedinger, approssimazioni e struttura della materia.

Soluzione approssimata dell'equazione di Schoedinger (metodo Hatree-Fock, HF) e sviluppo di un codice QM in grado di calcolarla.

La simmetria: una proprietà intrinseca e fondamentale della materia. Simmetria puntuale, gruppi ciclici e gruppo delle traslazioni del cristallo.

Il reticolo reciproco: il cristallo a raggi X.

Metodo HF per cristalli periodici: ruolo fondamentale della simmetria.

Proprietà della materia: densità degli stati, bande, spettri elettronici e fononici.

Proprietà di risposta: applicazione di un campo elettrico (proprietà ottiche ed elettriche).

Proprietà di risposta: applicazione di una deformazione meccanica (bulk modulus, costanti elastiche, piezoelettricità).

English

A wave-function to describe atoms, molecules and crystals.

A wave-function as a probability density: review of the Postulate of quantum-mechanic (QM) in agreement with the Copenhagen School.

Schroedinger equations, approximations and the structure of matter.

Approximated solution of the Schroedinger equation (the Hartree-Fock method, HF) and its coding into a QM software.

Symmetry: a fundamental property of matter. Point symmetry, cyclic group and translational space groups.

The reciprocal lattice: the crystal by X ray.

HF method as applied to periodic systems: the fundamental role of Symmetry.

Properties of matter: density of states, bands, electrons and phonon spectra.

Response properties due to the application of an external electric field (optical and electronic properties).

Response properties due to the application of an external strain (bulk modulus, elastic constants, piezoelectricity).

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

Italiano

Appunti del Corso, a cura di S. Casassa.

A. Szabo and N. S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry, Dover Publication, New York.

R. Dovesi, B. Civalleri, R. Orlando, C. Roetti, and V. R. Saunders,
Ab Initio Quantum Simulation in Solid State Chemistry
Reviews in Computational Chemistry, Chapter 1, Volume 21, John Wiley & Sons, Inc, New York, 2005

D.A. McQuarrie and J.D. Simon, Quantum Chemistry: a molecular approach, University Science Book

I. A. Levine, Quantum Chemistry, Pearson Edition

English

Original notes and slides by S. Casassa.

CRYSTAL User's Manual.

A. Szabo and N. S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry, Dover Publication, New York.

R. Dovesi, B. Civalleri, R. Orlando, C. Roetti, and V. R. Saunders,
Ab Initio Quantum Simulation in Solid State Chemistry
Reviews in Computational Chemistry, Chapter 1, Volume 21, John Wiley & Sons, Inc, New York, 2005

D.A. McQuarrie and J.D. Simon, Quantum Chemistry: a molecular approach, University Science Book

I. A. Levine, Quantum Chemistry, Pearson Edition

NOTA

Italiano

Tutti gli argomenti richiesti nei prerequisiti, compreso le nozioni di algebra lineare necessarie per meglio apprezzare la trattazione matematica, verranno ripresi durante le lezioni frontali in modo da garantire a studentesse e studenti la miglior fruizione del corso.

English

All the arguments underlined in the Prerequisites section, included some basic concepts of linear algebra, will be resumed during the lectures in order to allow a complete fruition of the teaching.

Pagina web del corso: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?_id=iju5

MODELLISTICA MOLECOLARE

MOLECULAR MODELLING

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	CHI0058
Docente:	Dott. Carlo Canepa (Titolare del corso) Dott. Giovanni Ghigo (Titolare del corso)
Contatti docente:	011 670 7530, carlo.canepa@unito.it
Anno:	1° anno 2° anno
Tipologia:	Caratterizzante
Crediti/Valenza:	6
SSD attività didattica:	CHIM/06 - chimica organica
Erogazione:	Tradizionale
Lingua:	Italiano
Frequenza:	Obbligatoria
Tipologia esame:	Orale

PREREQUISITI

Italiano

Conoscenza di base della chimica organica nei suoi aspetti chimico-fisici e meccanicistici.

English

Basic knowledge of the physico-chemical tools of mechanistic organic chemistry.

OBIETTIVI FORMATIVI

Italiano

La finalità del corso volge all'acquisizione da parte dello studente degli strumenti di base per la trattazione modellistica su base quantitativa dell'equilibrio e delle velocità di reazione in chimica organica. In particolare, i metodi teorici e computazionali trattati consentono l'ottenimento di dati termodinamici e cinetici per i quali è riconosciuto un ruolo (sia come tali, sia nel confronto con i dati sperimentali) nella elucidazione dei meccanismi. In taluni processi innovativi (quali la catalisi da parte di macromolecole, cristalli, reazioni in fase condensata ad alta temperatura e/o pressione) il modello teorico-computazionale può costituire la principale risorsa per la soluzione di problemi scientifici e applicativi.

English

Students attending the molecular modelling course will be acquainted with the basic knowledge of the most common tools used in the quantitative modelling of both equilibria and rates in organic chemistry. In particular, detailing the theoretical and computational methods allow the students to be able to determine the thermodynamic and kinetic quantities relevant to mechanistic studies. In innovative processes, such as enzyme-catalized reactions, reactions on surfaces, and high-temperature or high-pressure transformations, theoretical modelling may constitute the main resource to answer scientific questions and develop relevant applications.

RISULTATI DELL'APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano

Padronanza dei metodi sulla reattività illustrati nel corso e capacità operativa nella costruzione di un modello teorico-computazionale di un processo chimico. Capacità di analisi critica dei dati ottenuti.

English

Muster the theoretical and computational methods expounded in the lectures and acquire an operative ability to model a chemical process. Accomplish the skill to perform a discerning analysis of computational results.

MODALITA' DI INSEGNAMENTO

Italiano

Lezioni in aula con esercizi (40 ore) ed esercitazioni al calcolatore in aula informatica (16 ore).

English

Classroom lectures and exercises (40 hours), computer simulations in the lab (16 hours).

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano

Esame orale con domande sugli argomenti del programma e risoluzione di problemi. Valutazione in trentesimi della comprensione e della chiarezza espositiva.

Valutazione in trentesimi dei risultati ottenuti nelle esercitazioni al calcolatore raccolti in forma scritta.

la media pesata delle due componenti costituisce il voto finale.

English

The oral exam entails questions on the various theoretical topics as well as solving numerical problems.

Evaluation of the computational results obtained in the lab.

PROGRAMMA

Italiano

Le grandezze coinvolte nella modellistica molecolare. Introduzione al corso. Dinamica dei sistemi chimici, loro modellizzazione e ruolo dei meccanismi di reazione. Accuratezza dei calcoli quantomeccanici su sistemi molecolari. Discussione dei parametri di attivazione sperimentali di reazioni bimolecolari. Analisi delle deviazioni standard dei parametri di attivazione per la termolisi di N-alchil-N-nitrosoammidi.

Relazione tra l'evoluzione dei sistemi chimici e la loro energia totale. Ruolo dell'energia cinetica e potenziale nell'evoluzione di un sistema chimico in fase gas ed in fase condensata. Dipendenza della costante cinetica dalla temperatura per reazioni in fase gas. Reazioni tra radicali e ione-molecola. Equazioni del moto nel campo centrale. Calcolo degli urti efficaci per reazioni con e senza barriera.

Coefficienti di velocità e temperatura. Condizioni energetiche iniziali per gli urti. Discussione della dipendenza dei coefficienti di velocità dalla temperatura in relazione alle barriere di energia potenziale. Relazione tra barriere in energia libera, costanti cinetiche e tempi di dimezzamento per reazioni monomolecolari secondo la formulazione termodinamica della teoria dello stato di transizione.

Energia ed entropia negli equilibri. Analisi dei fattori energetici ed entropici sulla posizione dell'equilibrio di dissociazione degli acidi cloroacetici. Hamiltoniano multielettronico ed approssimazione di Born-Oppenheimer. Coordinate cartesiane ed interne per un sistema reattivo molecolare.

La superficie di energia potenziale di un sistema reattivo. Superficie di energia potenziale. Espansione quadratica dell'energia potenziale. Gradiente ed Hessiana. Punti critici e loro caratterizzazione. Specie chimicamente stabili, intermedi di reazione e strutture di transizione. Coordinata di reazione. Problema conformazionale dell'1,2-difluoroetano.

Statistica e medie termodinamiche. Medie termodinamiche nei casi quantistico e classico. Distribuzione di Maxwell-Boltzmann e densità degli stati. Densità degli stati di una particella in una buca di potenziale infinita. Funzione di partizione traslazionale nei casi monodimensionale e tridimensionale. Energia media traslazionale. Relazione tra la sezione d'urto e la costante cinetica bimolecolare.

Derivazione della teoria delle collisioni. Teoria delle collisioni per particelle senza struttura. Espressioni per la costante cinetica nei casi con e senza barriera di energia potenziale. Lunghezza d'onda di De Broglie per elettroni e nuclei.

Calcolo di grandezze termodinamiche: teoria. Proprietà della funzione di partizione: significato e valori dei contributi elettronico e traslazionale. Funzione di partizione di sistemi macroscopici e microscopici. I vari contributi alla funzione di partizione molecolare. Espressioni delle funzioni di partizione per sistemi di particelle distinguibili ed indistinguibili. Approssimazione classica della densità degli stati vibrazionale, della funzione di partizione e dell'energia media vibrazionale. Funzione di partizione vibrazionale quantistica. Espressione statistica per l'energia.

Calcolo di grandezze termodinamiche: esempi. Espressione statistica per l'entropia. Relazione tra energia, entropia e funzioni di partizione. Energie libere di Helmholtz e Gibbs. Derivazione dell'espressione statistica per la costante di equilibrio in un sistema a temperatura e pressione costanti.

Discussione dell'espressione di Arrhenius. Reazione di alchilazione della piridina: struttura dei prodotti. Esercizi numerici. Espressione di Arrhenius per la dipendenza della costante cinetica dalla temperatura. Linearizzazione dell'espressione di Arrhenius. Ottenimento dei parametri di attivazione di Arrhenius per regressione non lineare.

Derivazione della teoria dello stato di transizione. Discussione della deviazione standard dei parametri di Arrhenius per la termolisi delle N-alchil-N-nitrosoammidi. Ipotesi alla base della teoria dello stato di transizione. Derivazione e discussione dell'espressione della costante cinetica secondo la teoria dello stato di transizione. Calcolo della costante cinetica per la N-alchilazione della piridina in acetone.

Interpretazione termodinamica della teoria dello stato di transizione. Formulazione termodinamica della teoria dello stato di transizione per processi monomolecolari: equazione di Eyring. Relazioni tra parametri di attivazione dell'equazione di Eyring ed i corrispondenti parametri dell'equazione di Arrhenius nel caso monomolecolare. Formulazione termodinamica della teoria dello stato di transizione per processi bimolecolari: equazione di Eyring. Relazioni tra parametri di attivazione dell'equazione di Eyring ed i corrispondenti parametri dell'equazione di Arrhenius nel caso bimolecolare.

Modelli per reazioni in solvente. Energie libere di idratazione di ioni. Energie libere di trasferimento di fase per composti ionici e polari. Esame di costanti di velocità sperimentali per processi bimolecolari e monomolecolari in vari solventi. Entropie di attivazione sperimentali per vari processi. Complesso ammoniaca-acido cloridrico: strutture ed energie libere in fase gassosa ed in soluzione. Metodo del mezzo continuo polarizzabile. Costanti dielettriche dei solventi.

Metodi SCRF e della supermolecola. Metodo della supermolecola. Profili di reazione in fase gas e secondo il modello del mezzo continuo polarizzabile. Esercitazione in aula sulla reazione di sostituzione nucleofila bimolecolare in fase condensata. Profilo di reazione secondo il modello della supermolecola. Ruolo del controione nel meccanismo di reazione.

La teoria di Lennard Jones-Devonshire per reazioni chimiche. Rivisitazione della N-alchilazione della piridina trattata con i metodi del mezzo continuo polarizzabile. Catalisi acida nel meccanismo di epossidazione degli alcheni con peracidi. Entropie di vaporizzazione sperimentali e calcolate con la teoria del mezzo continuo polarizzabile. Correzioni dinamiche alle funzioni di partizione per le soluzioni. Teoria di Lennard Jones-Devonshire. Volume libero di traslazione per soluti. Integrale configurazionale.

Il calcolo dell'entropia di attivazione. Espressione di Eyring per la funzione di partizione rotazionale in soluzione. Confronto tra entropie di vaporizzazione sperimentali e calcolate con la teoria del mezzo continuo polarizzabile e del campo medio.

Barriere di reazione calcolate per reazioni catalizzate da enzimi. Confronto tra le entropie di attivazione calcolate e

le corrispondenti ottenute dall'equazione di Eyring per la fase gas e la soluzione. Esempificazione sull'alchilazione della 3-bromopiridina. La catalisi enzimatica dai dati sperimentali. Catalisi enzimatica: introduzione. Tempi di dimezzamento di reazioni spontanee e catalizzate da enzimi. Grafico di Harcourt. Meccanismi proposti per la catalisi.

Idrolisi di esteri catalizzata da alfa-chimotripsina. Cinetica di Michaelis-Menten. Decarbossilazione della glicina. Decarbossilazione dell'acido amminofornilacetico: confronto tra la fase gas e la soluzione acquosa. Strategie per la decarbossilazione enzimatica di amminoacidi: enzimi dipendenti dal piruvato e dal piridossal fosfato. Modelli computazionali del cammino di reazione e discussione delle barriere di reazione nei vari casi. Energetica di base per l'idrolisi acquosa dell'acetato di metile. Effetto del sito attivo sulla barriera di reazione. Idrolisi dell'estere etilico dell'N-acetil-L-triptofano e dell'N-acetil-L-tirosina.

La dinamica di sistemi con molte coordinate. Curvatura dei grafici di Eyring per reazioni enzimatiche. Costante cinetica per un sistema con un oscillatore attivo. Lagrangiana di un sistema di oscillatori accoppiati. Trasferimento di energia tra modi normali. Espressione della costante cinetica monomolecolare per un sistema con oscillatori accoppiati alla coordinata di reazione.

Analisi della curvatura dei grafici di Eyring per processi enzimatici. Discussione della dipendenza dalla barriera di reazione e dal numero di oscillatori attivi. Grafico di Eyring per l'idrolisi di polipeptidi catalizzata da alfa-chimotripsina. Confronto tra la barriera di reazione ottenuta per regressione a varie espressioni della costante cinetica. Curvatura dei grafici di Eyring. Analisi della costante cinetica per la reazione di alchilazione della 3-bromopiridina.

Esercitazioni al calcolatore:

1. Confronto tra l'effetto stabilizzante sui carbocationi dei gruppi metilico e ciclopropilico.
2. Reazione di trasferimento protonico ed effetto cinetico isotopico.
3. Reazione di sostituzione nucleofila bimolecolare ed effetto del solvente.
4. Sistemi diradicalici e diradicaloidi: la molecole di O₂; la dissociazione omolitica di Li₂. Stati eccitati ed effetto del solvente.

English

The dynamics of reactive systems and the choice of state variables. The accuracy of quantum chemistry calculations. A phenomenological description of the temperature dependence of rate constants for the S_N2 reactions. The standard deviation of activation parameters of the thermolysis of N-alkyl-N-nitrosoamides. The role of kinetic and potential energy in the time evolution of chemical systems and the temperature dependence of rate coefficients in the gas phase and the condensed phase. The equation of motion in a central field. Different behavior for reactions with and without a potential energy barrier. A phenomenological description of the relation between the free-energy barriers, rate coefficients, and half lives according to the thermodynamic formulation of TST.

Energy and entropy in equilibria: an analysis of the role of enthalpy and entropy of reaction in the dissociation of chloroacetic acids.

A survey of the Hamiltonian and the Born-Oppenheimer approximation for many-electron systems. Cartesian and Lagrangian coordinates and the potential energy surface. The quadratic approximation of the potential energy surface. The gradient and the Hessian matrix. The geometric definition of critical points on the potential energy surface of interest in chemistry: minima and first-order saddle points. Problem: the conformations of 1,2-difluoroethane.

Density of states, partition functions, and thermodynamic averages. The quantum expression and the classical approximation. Translational, rotational, and vibrational energies. Partition functions for distinguishable and indistinguishable particles.

The statistical expression for entropy and energy. Helmholtz and Gibbs free energies. The statistical expression for

the equilibrium constant and the calculation of the reaction yield. Problem: the alkylation of pyridines and the structure of products.

The Arrhenius formulation of the rate coefficient. Obtaining parameters of activation from experimental data. The linearized Arrhenius expression.

The assumptions of transition state theory (TST). The rate coefficient according to TST for unimolecular and bimolecular reactions. Problem: the gas-phase calculation of the rate coefficient for the alkylation of pyridines. Rate coefficients from experimental data. The thermodynamic formulation of TST and the Eyring equation. The relation between the activation parameters of the Arrhenius and Eyring formulations for unimolecular and bimolecular reactions.

Free energy of hydration for ions. Phase-transfer free energies of ionic and polar compounds. An overview of experimental rate constants for reactions in various solvents.

Experimental entropies of activation. The ammonia-hydrochloric acid cluster: structure and free energy in the gas-phase, the polarizable-continuum, and supermolecule approaches. The dielectric constants of solvents. The alkylation of pyridines revisited within the SCRf approximation. The supermolecule potential energy profile. The counter-ion and its mechanistic role. Problem: the nucleophilic substitution of iodine. Acid catalysis in the epoxidation of alkenes.

The Lennard Jones-Devonshire theory of liquids and chemical reactivity in the condensed phase. The corrections to the partition function for solutes. The volume of free translation and the configurational integral. The Eyring expression for the rotational partition function in solution. The entropy of activation according to the SCRf and mean-field approximations.

Enzyme catalysis: half lives of spontaneous and enzyme-catalyzed reactions. The Harcourt plot and the Pauling mechanism of enzyme catalysis. The kinetics of Michaelis-Menten. The computational study of the decarboxylation of glycine and aminofornylacetic acid in the TST approach. The strategies for aminoacid decarboxylation in nature: pyruvoyl- and pyridoxal phosphate-dependent enzymes. Computational models for reaction paths in the two cases. The hydrolysis of esters catalyzed by alpha-chymotrypsin. The computational study on the hydrolysis of methyl acetate. The effect of interactions with the the active site on the reaction barrier for hydrolysis of N-acetyl-L-tryptophan and N-acetyl-L-tyrosine.

The reaction barrier for the oxygen atom transfer from C4 α -hydroperoxyflavin and the counter-ion effect.

Rate coefficient for a system with one active oscillator. Lagrangian of a system of coupled oscillators and the energy transfer between vibrational modes. The unimolecular rate constant for a system of oscillators coupled to the reaction coordinate. Dependence of the rate constant from the barrier and the number of active oscillators. The curvature of the Eyring plots for the enzyme-catalyzed hydrolysis of polypeptides.

Computer simulations. The stabilization of carbonium ions by the methyl and cyclopropyl group. Proton transfer reaction and kinetic isotope effect. Bimolecular nucleophilic substitution reaction and effect of the solvent. Diradicals and diradicaloids: O₂ molecule; homolytic dissociation of Li₂. Excited states and solvent effect.

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

Italiano

1. Donald A. McQuarrie Physical Chemistry: A Molecular Approach University Science Books.
2. Frank Jensen Introduction to Computational Chemistry John Wiley and Sons.
3. Appunti: Gli appunti contengono
 - (a) i contenuti fondamentali raccolti in modo sintetico
 - (b) i dati presentati su esempi di reattività ad esemplificazione e supporto delle teorie illustrate.
4. Dispense fornite per le esercitazioni.

English

1. Donald A. McQuarrie Physical Chemistry: A Molecular Approach University Science Books.
2. Frank Jensen Introduction to Computational Chemistry John Wiley and Sons.
3. Notes with a synthetic presentation of the lectures and a collection of data and examples to illustrate the theoretical methods.
4. Notes for the computational lab.

NOTA

NB: La frequenza alle esercitazioni è OBBLIGATORIA.

Pagina web del corso: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?_id=fp1g

NUOVI ORIENTAMENTI IN SINTESI ORGANICA

New Trends in Organic Chemistry

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	CHI0057
Docente:	Dott. Margherita Barbero (Titolare del corso) Prof. Silvia Giordani (Titolare del corso)
Contatti docente:	0116707645, <i>margherita.barbero@unito.it</i>
Anno:	2° anno
Tipologia:	Caratterizzante
Crediti/Valenza:	6
SSD attività didattica:	CHIM/06 - chimica organica
Erogazione:	Tradizionale
Lingua:	Italiano
Frequenza:	Facoltativa
Tipologia esame:	Orale

PREREQUISITI

italiano

Solida conoscenza di gruppi funzionali, reattività e meccanismi di reazione

inglese

Background in organic functional groups, reactivity and reaction mechanisms

OBIETTIVI FORMATIVI

italiano

L'insegnamento si propone di fornire agli studenti gli strumenti per comprendere e pianificare sintesi e tecniche moderne in chimica organica.

inglese

The course main objective is to provide students with the capacity of planning and understanding synthesis and modern technologies in organic chemistry.

RISULTATI DELL'APPRENDIMENTO ATTESI

italiano

Al termine dell'insegnamento lo studente dovrà dimostrare di essere in grado di comprendere ed applicare alcuni importanti concetti generali riguardanti le reazioni di funzionalizzazione di molecole e nanomateriali a base di carbonio.

Dovrà inoltre conoscere l'impiego di condizioni di reazioni tipiche della green chemistry, in particolare solventi e fonti energetiche non convenzionali.

inglese

At the end of the course the student should be confident with the comprehension and application of the main general concepts about functionalization of carbon based molecules and nanomaterial. Furthermore he/she should learn non conventional reaction conditions, typical of the green chemistry, such as green solvents and MWs/US

heating.

MODALITA' DI INSEGNAMENTO

italiano

Modalità di insegnamento Lezioni frontali

La frequenza alle lezioni è facoltativa.

inglese

Teaching methods Lectures

Attendance is optional .

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

italiano

L'esame consiste in una prova orale articolata in quattro domande: due per la parte relativa alla sintesi e funzionalizzazione di nanomateriali a base di carbonio e due per la parte relativa alla green chemistry. Ogni parte viene valutata in 30esimi, il voto finale corrisponde alla media matematica dei due voti.

inglese

The exam consists of an oral exam structured in four questions: two for the part on the synthesis and functionalization of carbon based nanomaterials and two for the part on the green chemistry. Each part is evaluated, the final grade corresponds to the average of the two marks.

PROGRAMMA

italiano

Molecole e nanomateriali a base di carbonio (fullereni, nanotubi, grafene). Sintesi e funzionalizzazione chimica.

Green chemistry: i 12 principi fondamentali. Atom economy (esempi). Solventi non convenzionali con esempi di applicazione in sintesi organica: sistemi solvent-free; fluidi supercritici (CO₂ e H₂O); acqua; liquidi ionici (struttura, proprietà). Fonti energetiche alternative: fotochimica, ultrasuoni e microonde; esempi di utilizzo delle diverse condizioni, anche combinate. Catalisi e green chemistry: catalisi omogenea ed eterogenea. Organocatalisi: principi e recenti applicazioni in sintesi asimmetrica.

inglese

Carbon based molecules and nanomaterials (fullerenes, nanotubes, graphene). Synthesis and chemical functionalization.

Green chemistry: the 12 principles. Atom economy (with examples). Green solvents in organic synthesis: solvent-free conditions; supercritical fluids (CO₂ and H₂O); water; ionic liquids (structure and properties). Non conventional heating: photochemistry, sonication and microwave heating; examples of applications of both single and combined methods . Catalysis and green chemistry: homogeneous and heterogeneous conditions. Organocatalysis: principles and recent applications in asymmetric synthesis.

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

italiano

Il materiale didattico verrà fornito dai docenti in forma di appunti.

Pagina web del corso: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Search?search=%7bdocente%7d%20%3d~%20%2f%5cbcprandi%5cb%2f;fields=_delete

inglese

Educational material supplied by teachers.

website: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Search?search=%7bdocente%7d%20%3d~%20%2f%5cbcprandi%5cb%2f;fields=_delete

Pagina web del corso: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?_id=v2k7

PROGETTAZIONE EUROPEA, DIRITTO DELL'INNOVAZIONE E DELLA PROPRIETÀ INTELLETTUALE

EUROPEAN PROJECTS, INNOVATION AND INTELLECTUAL PROPERTY LAW

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	CHI0106
Docente:	
Contatti docente:	
Anno:	1° anno 2° anno
Tipologia:	Affine o integrativo
Crediti/Valenza:	6
SSD attività didattica:	IUS/05 - diritto dell'economia
Erogazione:	Tradizionale
Lingua:	Italiano
Frequenza:	Facoltativa
Tipologia esame:	Orale

PREREQUISITI

Non sono richiesti prerequisiti.

OBIETTIVI FORMATIVI

Italiano

L'insegnamento si propone di inquadrare, in chiave sistematica e funzionale alle future attività di ricerca e professionali di un laureato in Chimica, la disciplina giuridica della gestione di programmi e progetti di ricerca e la normativa in materia di tutela delle invenzioni e dell'innovazione. In considerazione del fatto che l'insegnamento è rivolto a studenti che, per lo più, non possiedono conoscenze giuridiche, nonché dell'eterogeneità degli ambiti normativi trattati, l'impostazione si articola su più moduli: dopo un primo modulo di base sugli istituti fondamentali del diritto pubblico italiano ed europeo, amministrativo e privato, sono previsti moduli specialistici incentrati sulla gestione di progetti di ricerca comunitari, sulla normativa in materia di brevetti e, in particolare, sulla tutela delle invenzioni nel settore chimico.

English

The course aims to provide students with a general overview of the legal issues involved in management of research projects and programmes and in the protection of inventions and innovation.

The course is divided into sections: the first section is an introduction to the basic elements of european and italian public, administrative and private law; the following sections are focused on management of european research projects and on patent law, with particular reference to chemical patents.

RISULTATI DELL'APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano

Al termine dell'insegnamento lo studente dovrà dimostrare di essere in condizione di conoscere e applicare le disposizioni di riferimento del vigente programma quadro europeo Horizon 2020 in relazione alla gestione amministrativa e legale di progetti di ricerca. Dovrà altresì possedere un'adeguata conoscenza degli istituti fondamentali del diritto industriale per quanto attiene, in particolare, alla tutela dei brevetti e delle invenzioni.

English

By the end of the course students should be able to know the applicable regulations of European Research Programme Horizon 2020, with particular reference to administrative and legal management of research projects. They also should be able to know the basic elements of Italian patent law.

MODALITA' DI INSEGNAMENTO

Italiano

Lezioni frontali. Un congruo numero di ore sarà dedicato alle applicazioni delle normative esaminate, con l'analisi di casi giurisprudenziali ed esercitazioni.

English

Frontal lectures with case studies (legal cases).

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano

L'esame consta di una prova orale, articolata su tre domande che verteranno su tutto il programma dell'insegnamento. Ogni domanda verrà valutata in trentesimi; il voto dell'esame sarà dato dalla media aritmetica semplice delle valutazioni delle singole domande. Gli studenti frequentanti potranno suddividere il programma d'esame in due prove intermedie, al termine dei periodi didattici nei quali si svolgeranno le lezioni.

English

Oral examination, consisting of three questions regarding the whole course programme. Rating scale for each question is from 1 to 30; the mark is their arithmetic mean.

Students who regularly attend lectures may split the examination into two parts.

ATTIVITÀ DI SUPPORTO

Italiano

English

PROGRAMMA

Italiano

Modulo 1 - Nozioni giuridiche di base (Elementi di diritto costituzionale, amministrativo, europeo e civile): Fonti del diritto nazionale - Unione Europea: ordinamento, atti normativi - Atti amministrativi: elementi, vizi, ricorsi - Obbligazioni, contratti, danno, responsabilità contrattuale ed extracontrattuale.

Modulo 2 - Gestione di progetti europei: Horizon 2020 (Programma Quadro europeo per la ricerca e l'innovazione 2014-2020): aspetti giuridici e amministrativi - La disciplina delle start up innovative.

Modulo 3 - La tutela delle invenzioni (elementi di diritto industriale): Definizione giuridica di invenzione – Il brevetto: funzione e struttura – Requisiti di brevettabilità – Procedura di brevettazione – Diritti nascenti dall'invenzione - Tutela del brevetto e delle invenzioni non brevettate – Cenni al contenzioso in materia di proprietà industriale.

Modulo 4 - I brevetti nel settore della chimica: Domanda di brevetto per formule generali e invenzione di selezione – Individuazione del composto; requisiti di novità ed originalità – Estensione del brevetto chimico.

English

Section 1: Elements of constitutional, administrative, european and civil law.

Section 2: Legal and administrative aspects of European projects management: Horizon 2020 - Innovative startups: legal framework.

Section 3: Elements of patent law

Section 4: Chemical patents

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

Italiano

Per il modulo 1: Del Giudice, Compendio di diritto pubblico, Edizioni Simone (u.e.), limitatamente alle seguenti parti: Parte prima: capitoli 1, 7, 8; Parte seconda: capitolo 8 - sezione prima.

Per il modulo 2: materiale a cura del docente

Per i moduli 3 e 4: Vanzetti - Di Cataldo, Manuale di diritto industriale, Giuffrè Editore (u.e.), limitatamente alle seguenti parti: Parte terza (escluso Cap. XIII); Parte quarta: paragrafi 1, 2, 3, 5, 6, 8, 9, 10. In alternativa: Lucci, Compendio di diritto industriale, Edizioni Simone (u.e.), limitatamente alla Parte terza.

English

Section 1: Del Giudice, Compendio di diritto pubblico, Edizioni Simone - only following parts: Part 1: chapters 1, 7, 8; Part 2: chapter 8 - section 1.

Section 2: training aid provided by the professor.

Section 3 and 4: Vanzetti - Di Cataldo, Manuale di diritto industriale, Giuffrè Editore - only following parts: Part 3

(chapter XIII exclusive); Part 4 - only following paragraphs: 1, 2, 3, 5, 6, 8, 9, 10 or, alternatively, Lucci, Compendio di diritto industriale, Edizioni Simone - only Part 3.

Pagina web del corso: <http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?id=egfc>

RADIOCHIMICA

RADIOCHEMISTRY

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	CHI0066
Docente:	Dott. Paola Benzi (Titolare del corso)
Contatti docente:	011 6707581, paola.benzi@unito.it
Anno:	1° anno
Tipologia:	A scelta dello studente
Crediti/Valenza:	4
SSD attività didattica:	CHIM/03 - chimica generale e inorganica
Erogazione:	Tradizionale
Lingua:	Italiano
Frequenza:	Facoltativa
Tipologia esame:	Orale

PREREQUISITI

Conoscenze di base di Chimica Generale e Matematica

OBIETTIVI FORMATIVI

Italiano

L'obiettivo del corso è quello di fornire la conoscenza di base sulla radioattività e le leggi del decadimento radioattivo. Fornire le basi per comprendere l'interazione tra le radiazioni e la materia e quindi come possono essere rivelate. Far conoscere i meccanismi che regolano le principali reazioni nucleari. Fornire elementi di dosimetria e le basi per la comprensione degli effetti delle radiazioni sul materiale biologico.

Far comprendere le principali applicazioni della radioattività in chimica generale e analitica, nelle scienze della vita (applicazioni mediche, biologiche, agroalimentari), nella datazione, nell'industria, nella ricerca scientifica e tecnologica, nella produzione di energia.

Inglese

The main goal of the course is to introduce the students to the knowledge of the principles of radioactivity and radiochemistry: the most fundamental types of radiation (alpha, beta and gamma), the laws of radioactive decay, the radiation/matter interaction and radiation detectors. The course also provide elements of dosimetry and the effects of radiation on biological material. Moreover the course gives a introduction about the application of radioactivity in general and analytical chemistry, life sciences (medical, biological, agricultural and food), dating techniques, industry, science and technology, energy production.

RISULTATI DELL'APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano

Apprendimento dei principi base di radiochimica e di chimica nucleare relativi alla stabilità e modi di decadimento dei radionuclidi, all'interazione della radiazione con la materia e alle possibili applicazioni dell'impiego di radioisotopi e radiazioni in differenti ambiti.

Inglese

Knowledge of the fundamentals of radiochemistry and nuclear chemistry, the decay modes of the radionuclides, the laws of radioactive decay, the radiation/matter interaction and the possible different applications of

radioisotopes and radiation.

MODALITA' DI INSEGNAMENTO

Italiano

Lezioni frontali

Inglese

Frontal lessons

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano

L'esame è orale ed è finalizzato alla verifica dell'apprendimento di quanto spiegato a lezione.

La valutazione è in trentesimi.

Inglese

The exam is oral and will be devoted to verify the knowledge of what has been explained during the lessons.

The evaluation will be expressed in thirtieths.

PROGRAMMA

Italiano

Il nucleo atomico: raggio, massa ed energia di legame. Modelli nucleari. Condizioni di stabilità e instabilità dei nuclidi. Leggi del decadimento radioattivo. Decadimento alfa, beta, transizione gamma, fissione spontanea. Reazioni nucleari: energia, probabilità e meccanismi di reazione. Radioattività naturale e artificiale. Radionuclidi in natura: famiglie radioattive, equilibrio secolare e transiente.

Assorbimento delle radiazioni nella materia. Tecniche di rivelazione: rivelatori a ionizzazione, a scintillazione, a semiconduttore, tecniche autoradiografiche. Elementi di dosimetria e radioprotezione. Effetti biologici della radiazione nucleare. Il radon e sue tecniche di rivelazione. Metodi di datazione archeologica e geologica, con le tecniche nucleari.

Produzione dei radionuclidi

Applicazioni analitiche dei radionuclidi: analisi radiometriche per diluizione isotopica e per attivazione neutronica.

Applicazione dei radionuclidi nelle scienze della vita: applicazioni agroalimentari, agrobiologiche, nel campo della sterilizzazione, in studi ecologici ed ambientali, fisiologici e metabolici, in chimica clinica, medicina nucleare per diagnosi e terapia.

Applicazioni tecniche ed industriali e dei beni culturali. Applicazioni nella ricerca scientifica e tecnologica.

Inglese

The atomic nucleus: radius, mass and binding energy. Nuclear models. Conditions of stability and instability of nuclides. Laws of radioactive decay. Alpha, beta decay, gamma transition, spontaneous fission. Nuclear reactions: energy, probability and reaction mechanisms. Natural and artificial radioactivity. Radionuclides in nature: families radioactive, secular and transient equilibrium.

Absorption of radiation. Detection techniques: ionization detectors, scintillation, semiconductor, autoradiographic techniques. Elements of dosimetry and radiation protection. Biological effects of nuclear radiation. Radon and its

detection techniques. Archaeological and geological dating methods, with nuclear techniques.
Production of radionuclides.

Analytical applications of radionuclides: isotopic dilution, neutron activation analysis.

Radionuclides in the life sciences: applications in agri-food industry, sterilization, ecological and environmental studies, physiological and metabolic studies, clinical chemistry, nuclear medicine for diagnosis and therapy.

Technical and industrial applications. Applications in scientific and technological research.

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

Italiano

Appunti delle lezioni del corso

Libri:

C. Keller. Radiochemistry, John Wiley & Sons, New York(1988).

Jens-Volker Kratz. Nuclear and Radiochemistry: Fundaments and Applications, Wiley, 2013

Per approfondimenti:

Radiation Chemistry- Principles and Applications &n bsp; &nbs p; &n bsp; Farhataziz and
Michael A. J. Rodgers, editors

Inglese

Notes written by the teachers will be available on line

Books:

C. Keller. Radiochemistry, John Wiley & Sons, New York(1988).

Jens-Volker Kratz. Nuclear and Radiochemistry: Fundaments and Applications, Wiley, 2013

Radiation Chemistry- Principles and Applications &n bsp; &nbs p; &n bsp; Farhataziz and
Michael A. J. Rodgers, editors

Farhataziz and Michael A. J. Rodgers, editors Farhataziz and Michael A. J. Rodgers, editors

Pagina web del corso: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?_id=7spr

RISONANZE MAGNETICHE

Magnetic Resonance

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	CHI0049
Docente:	Prof. Roberto Gobetto (Titolare del corso) Prof. Mario Chiesa (Titolare del corso)
Contatti docente:	+39 011-6707520, roberto.gobetto@unito.it
Anno:	1° anno
Tipologia:	Di base
Crediti/Valenza:	6
SSD attività didattica:	CHIM/03 - chimica generale e inorganica
Erogazione:	Tradizionale
Lingua:	Italiano
Frequenza:	Obbligatoria
Tipologia esame:	Scritto

OBIETTIVI FORMATIVI

Italiano

Il corso presenta le nozioni di base delle tecniche di risonanza magnetica nucleare (NMR) ed elettronica (EPR). Obiettivo del corso è quello di fornire allo studente le nozioni principali per poter interpretare con sicurezza i parametri fondamentali degli spettri NMR e EPR. Nella parte pratica verranno effettuati esperimenti NMR ed EPR e verranno interpretati i relativi spettri.

English

The course provides an introduction to magnetic resonance spectroscopies explaining the basic principles of nuclear and electron magnetic resonance. Emphasis is given on applications, including problem-solving strategies for spectral interpretation and consequent molecular structure determination.

RISULTATI DELL'APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano

Al termine del corso lo studente deve dimostrare di conoscere i principi fondamentali e le principali applicazioni della spettroscopia NMR ed EPR. Deve saper scegliere gli opportuni esperimenti di risonanza magnetica rispetto alle informazioni strutturali che intende acquisire. Deve saper interpretare gli spettri ed assegnarne la struttura chimica corrispondente.

English

At the end of the course, students are expected to master the basic principles and main application of NMR and EPR spectroscopies. The student should also be able to indicate the more appropriate magnetic resonance experiment for acquiring information on specific molecular structures. The students are expected to understand and assign NMR and EPR spectra and propose the corresponding chemical structure. They should also be able to make informed statements about the validity of any results.

MODALITA' DI INSEGNAMENTO

Italiano

Il corso è basato su lezioni frontali corredate di slides, esercitazioni in aula e esercitazioni pratiche su strumentazioni NMR ed EPR aventi lo scopo di mettere in grado lo studente di orientarsi nella scelta del migliore esperimento atto a risolvere il problema di caratterizzazione strutturale, nella acquisizione e interpretazione degli spettri di risonanza magnetica.

English

The course is based on classical frontal lecture and workshop learning arrangements. Tutorial examples will be delivered together with practical lab sessions in order to provide the students with practical skills in the set-up and interpretation of magnetic resonance experiments (NMR and EPR)

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano

L'esame è costituito da una prova orale, che verte su tutto il programma svolto. La prova, verifica il grado di comprensione e padronanza della materia e la capacità di elaborazione personale raggiunte dallo studente e la capacità di risolvere problemi pratici.

English

The final examination consists of an oral exam aimed at evaluating the degree of understanding of the subject with emphasis on the acquisition of broad concepts and skills that allow knowledge to be applied.

PROGRAMMA

Italiano

Principi base della risonanza magnetica in trasformata di Fourier | parametri NMR: chemical shift, costanti di accoppiamento, tempi di rilassamento Nuclei della Tavola Periodica e proprietà NMR Sequenze di impulso 1D e 2D Interpretazione di spettri protonici e ¹³C Principi di NMR stato solido Utilizzo della strumentazione NMR/esercitazioni pratiche.

Concetti fondamentali di spettroscopia EPR in onda continua. Comportamento di un elettrone in un campo magnetico. L'effetto Zeeman. L'Hamiltoniano di spin. Crystal field splitting e accoppiamento spin-orbita. Il fattore g Interazione di un elettrone spaiato con nuclei dotati di spin nucleare. L'interazione iperfine. Contatto di Fermi e interazione dipolare. Il caso $S=1/2$, $I=1/2$. Interazione forte e debole. Interpretazione di spettri EPR di sistemi paramagnetici in soluzione e stato solido. Spettri EPR di metalli di transizione. Esercitazioni pratiche e teoriche

English

Basic Concepts of FT NMR, NMR parameters: chemical shift, coupling constant, relaxation time. NMR and the periodic table. 1D and 2D pulse sequences. Interpretation of ¹H and ¹³C spectra. Basic Concepts of solid state NMR. NMR instrumentation Basic concepts of continuous wave EPR spectroscopy. Zeeman effect, Crystal field splitting, spin orbit coupling, spin Hamiltonian. The g factor The hyperfine interaction. Fermi contact and dipolar interaction. The case of $S=1/2$, $I=1/2$. EPR spectra in liquid phase and solid state. EPR spectra of transition metal ions. Hands on instruments sessions.

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

Italiano

Il materiale didattico presentato a lezione è disponibile presso i docenti e sul sito del corso. E' fortemente consigliato l'utilizzo del seguente materiale per approfondimenti e integrazioni: Corso NMR di base – M. Botta, S. Chimichi, M. Fasano, R. Gobetto Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy – R.K. Harris;

EPR spectroscopy– M.Chiesa, E. Giamello - EAC Wiley

Infine sono di seguito indicati siti internet di interesse: www.quantum-physics.polytechnique.fr/

<http://www.easyspin.org/>

English

All material presented during the lectures is available on the web site, along with specific supporting material . The following text are suggested as further reading:

Corso NMR di base – M. Botta, S. Chimichi, M. Fasano, R. Gobetto Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy – R.K. Harris;

EPR spectroscopy– M.Chiesa, E. Giamello - EAC Wiley

The following web sites are of interest:

www.quantum-physics.polytechnique.fr/

<http://www.easyspin.org/>

Pagina web del corso: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?_id=dx7r

SINTESI E MECCANISMI IN CHIMICA ORGANICA

Synthesis and mechanisms in organic chemistry

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	CHI0048
Docente:	Prof. Glauco Tonachini (Titolare del corso) Prof. Cristina Prandi (Titolare del corso)
Contatti docente:	011-670 7648, glauco.tonachini@unito.it
Anno:	1° anno
Tipologia:	Caratterizzante
Crediti/Valenza:	8
SSD attività didattica:	CHIM/06 - chimica organica
Erogazione:	Tradizionale
Lingua:	Italiano
Frequenza:	Facoltativa
Tipologia esame:	Orale

PREREQUISITI

Per la parte di Sintesi (docente Cristina Prandi) Buona conoscenza della chimica organica di base, stereochemica e reattività dei gruppi funzionali. Tecniche di sintesi, isolamento e purificazione, nozioni di base di Chimica Generale, Chimica Organica e Chimica Fisica. Per la parte "Meccanismi" (G. Tonachini): Nozioni di base di chimica organica e chimica fisica, così come fornite dagli insegnamenti di chimica organica e chimica fisica del triennio. Fundamentals of organic chemistry, stereochemistry and reactivity of functional groups. Simple synthetic sequences, purification and identification of simple compounds. Physical chemistry, such as they are provided by the organic and physical chemistry courses of the first three years.

PROPEDEUTICO A

Nuovi orientamenti in sintesi organica Sintesi ed identificazione di composti organici

OBIETTIVI FORMATIVI

Italiano

L'insegnamento si propone obiettivi distinti per la parte di sintesi e per la parte di studio dei meccanismi.

Per la parte di Sintesi (Docente Prandi):

Al termine del corso, lo studente è in grado di scegliere la metodologia più adatta per la formazione di legami carbonio-carbonio utilizzando composti organometallici (preparati preventivamente o generati in situ), complessi p di metalli di transizione, con il massimo controllo di regioselettività, chemoselettività e stereoselettività.

Parte "Meccanismi" (G. Tonachini):

L'obiettivo è di fornire semplici strumenti teorici atti a razionalizzare o a predire in termini qualitativi l'andamento di una reazione chimica.

English

The course intends to reach two different goals depending on the Synthesis and the Mechanism section.

Synthesis Section (Teacher Prandi)

At the end of the course, the student will be able to choose the method best suited for the formation of carbon-

carbon bonds using organometallic compounds (prepared in advance or generated in situ), π complexes of transition metals, with the maximum control of regioselectivity, chemoselectivity and stereoselectivity.

Part "Mechanisms" (G. Tonachini):

The purpose is to provide simple theoretical tools, suitable to rationalize or predict qualitatively the outcome of some chemical reactions.

RISULTATI DELL'APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano

Per la parte di Sintesi (Docente Prandi): Il corso si propone di ampliare ed approfondire la conoscenza nel campo della sintesi e della reattività di strutture molecolari organiche attraverso l'apprendimento di concetti e metodi che caratterizzano la sintesi organica moderna. L'allievo dovrà essere in grado di affrontare con spirito critico la sequenza di passaggi proposti per una sintesi organica, fornendo anche suggerimenti personali al fine di ottimizzare i risultati voluti; di valutare gli aspetti chemo-, regio- e stereoselettivi di alcune importanti reazioni.

Parte "Meccanismi" (G. Tonachini):

Mettere in grado lo studente di elaborare una razionalizzazione dei motivi per cui una reazione organica è comune oppure non osservata. Lo studente dovrebbe essere in grado di definire una reazione come "permessa" o "proibita", intendendosi che il suo decorso sia relativamente facile oppure che presenti una barriera di energia significativa di origine elettronica. Questa capacità può essere introduttiva a studi ulteriori che mirino ad un esame quantitativo del decorso di una reazione chimica (energetica del processo, termochimica, valutazione quantitativa del meccanismo preferito, rapporto con la cinetica).

English

Synthesis Section (Teacher Prandi)

The course aims to broaden and deepen the knowledge in the field of synthesis and reactivity of organic molecular structures by learning concepts and methods that characterize the modern organic synthesis. The pupil must be able to deal with a critical sequence of steps proposed for an organic synthesis, as well as providing personal suggestions in order to optimize the desired results; to evaluate the aspects chemo-, regio- and stereoselective of some important reactions.

Part "Mechanisms" (G. Tonachini):

The objective is to make the student capable of rationalizing the reasons why an organic reaction is commonly observed or not. The student should acquire the capability of defining a reaction as "allowed" or "forbidden", meaning by these words that it is either energetically easy or presents a sizable barrier of electronic origin. This capability can be introductory to further learning aiming to define quantitatively the evolution of a chemical system (energetics and thermochemistry, mechanism assessment, relation with kinetics).

MODALITA' DI INSEGNAMENTO

Italiano

Per la parte di Sintesi (Docente Prandi):

Tradizionale: lezioni frontali in aula con l'ausilio di materiale PowerPoint messo a disposizione anticipatamente sul

sito web del corso.

Parte "Meccanismi" (G. Tonachini):

Il modulo consta di 3 CFU, equivalenti a 24 h di lezione. Le lezioni sono svolte principalmente alla lavagna, con l'ausilio del colore nel tracciare diagrammi e disegnare strutture molecolari.

English

Synthesis Section (Teacher Prandi)

Lessons in classroom, using PowerPoint slides that are available on the web site of the course.

Part "Mechanisms" (G. Tonachini):

Lessons (3 credits, i.e. 24 hours), delivered mainly by writing on the blackboard, with color drawing of molecular structures and diagrams.

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano

Parte "Sintesi" (C. Prandi)

L'esame prevede una prova orale che consiste in tre domande alle quali lo studente dovrà rispondere dimostrando di aver compreso i meccanismi delle reazioni trattate e progettare brevi sintesi totali.

Parte "Meccanismi" (G. Tonachini):

L'esame orale comprende da parte dello studente, oltre all'esposizione discorsiva sul tema richiesto, la stesura di diagrammi di vario tipo e il disegno di orbitali molecolari (MO) interagenti. L'esame è teso a verificare la chiarezza di idee e la chiarezza espositiva con cui lo studente usa speditamente i due strumenti teorici qualitativi ("di pronto impiego") proposti nel corso d'insegnamento. Con essi si devono esaminare una o due reazioni scelte tra una varietà di reazioni organiche, con lo scopo di definire se essa sia facile e veloce oppure lenta e magari non osservata, e inoltre magari di spiegare varie forme di selettività. L'esame orale permette un dialogo che pare possa evidenziare (più facilmente di uno scritto) il buon uso della logica e la coerenza nell'elaborare le analisi richieste.

Lo studente può scegliere liberamente l'ordine con cui sostenere le due parti, con il vincolo temporale di 6 mesi e/o tre appelli tra di esse, passato questo intervallo il voto già acquisito non sarà più considerato valido. Il voto finale è la media matematica degli esiti delle prove sostenute con i due docenti.

English

Part "Synthesis" (C. Prandi)

The oral exam is based on three different questions related to the three parts of the course. The student is required to demonstrate his knowledge on reaction mechanisms and design simple synthetic sequences.

Part "Mechanisms" (G. Tonachini):

The oral examination encompasses both a discussion of the requested theme and the drawing of diagrams of different kind and sketches of interacting molecular orbitals (MOs). It aims to assess how clear are the concepts to the student, and how lucidly she/he can talk about and use them. The two qualitative theoretical methods offered in the lectures should be used promptly by applying them to one/two reactions selected among a variety of organic reactions. The target is defining if a reaction is easy and fast, or slow and perhaps not observed. Moreover various

forms of selectivity might be discussed. The oral examination is believed to allow the assessment of the logic capabilities of the student, more than a written test.

The student can choose the order of the examination, but the delay between the exams of the two parts can not be longer than 6 months. The mark is the average of the two outcomes.

ATTIVITÀ DI SUPPORTO

Italiano

Non prevista

English

Not contemplated

PROGRAMMA

Italiano

Per la parte di Sintesi (Docente Prandi):

Reazioni Chemoselettive, Diastereoselettive.

SINTESI ENANTIOSLETTIVA. Definizioni. Strategie sintetiche, chiral pool, catalizzatori chirali, reagenti chirali

REAZIONI DI CROSS-COUPPLINGS. Generalità sui cross-couplings catalizzati dal palladio(0): reazioni di Heck, Suzuki, Stille, Negishi, Sonogashira e loro aspetti chemo e stereochimici. Applicazioni principali in sintesi con esempi. Complessi π -allilici del Pd. Reazioni metallo-ene. Reazioni domino. Reazioni catalizzate da Pd(II). Il ruolo dei leganti, angoli di cono, fosfine bidentate, fosfine di Buchwald, NHC carbeni. Reazione di Buchwald-Hartwig.

Catalisi da ORO. Reazioni di enini, attivazione di legami multipli nei confronti di nucleofili. Catalisi eterogenea, l' ruolo nelle reazioni di cross-coupling.

Parte "Meccanismi" (G. Tonachini):

- Teoria degli Orbitali di Frontiera e Regole di Woodward e Hoffmann. Concetti generali.
- Effetti sulla cinetica delle energie degli orbitali molecolari (MO).
- Effetto della loro polarizzazione sulla orientazione (regiochimica).
- Come gli MO possano influire sulla diastereoselettività.
- Applicazione a reazioni di cicloaddizione, reazioni elettrocicliche, reazioni chelotropiche, migrazioni sigmatropiche. Reazioni ioniche, radicaliche e fotochimiche.
- Diagrammi di correlazione di MO, di configurazioni elettroniche, di stati elettronici. Incroci reali ed evitati. Esempi.
- Transizioni diabatiche, relazione di Landau-Zener.

English

Synthesis Section (Teacher Prandi)

Chemoselectivity and Diastereoselectivity

ENANTIOSELECTIVE REACTIONS. Definitions, synthetic strategies, chiral pool, chiral catalysts, chiral reagents. Examples in asymmetric syntheses.

CROSS-COUPPLINGS REACTIONS. General information on cross-couplings catalyzed by palladium (0). Heck, Suzuki, Stille, Negishi, Sonogashira reactions and their chemo and stereochemical aspects. Main applications in synthesis with examples. π -allyl complexes of Palladium. Metallo-ene reactions. Domino reactions. Reactions catalyzed by Pd (II). The role of the ligands, cone angles, bidentate phosphines, Buchwald phosphines, NHC carbenes. Buchwald-Hartwig reaction.

Catalysis by GOLD. Reactions of enynes, activation of multiple bonds towards nucleophiles. Heterogeneous catalysis, gold in cross-coupling reactions.

- Frontier Orbitals Theory and Woodward-Hoffmann rules. General concepts.
- How MO energies can affect reaction rates.
- How their polarization can determine regioselectivity effects.
- How they can affect the diastereoselectivity.
- Application to cycloadditions, cheletropic reactions, electrocyclic reactions, sigmatropic rearrangements.
- Correlation diagrams for MOs, electron configurations, and electronic states. Real and avoided crossings. Examples.
- Diabatic transitions, Landau-Zener equation.

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

Italiano

Per la parte di Sintesi (Docente Prandi):

D. Qian, J. Zhang, Chem. Soc. Rev., 2015, 44, 677.

M. Livendahl, C. Goehry, F. Maseras, A.M. Echavarren, Chem. Commun., 2014, 50, 1533.

F. D.Toste et al. Nature. 2007, 446, 395.

Organic Chemistry di Clayden Greeves, Warren e Wothers; Oxford University Press

E' fortemente consigliato l'utilizzo Dispense PowerPoint nel materiale didattico.

Parte "Meccanismi" (G. Tonachini):

- Ian Fleming Molecular Orbitals and Organic Chemical Reactions J. Wiley and Sons, 2010.
- Addy Pross Theoretical and Physical Principles of Organic Reactivity J. Wiley and Sons, 1995.

English

Shynthesis Section (Teacher Prandi)

D. Qian, J. Zhang, Chem. Soc. Rev., 2015, 44, 677.

M. Livendahl, C. Goehry, F. Maseras, A.M. Echavarren, Chem. Commun., 2014, 50, 1533.

F. D.Toste et al. Nature. 2007, 446, 395.

PowerPoint slides published on the web site of the course.

Part "Mechanisms" (G. Tonachini):

- Ian Fleming Molecular Orbitals and Organic Chemical Reactions J. Wiley and Sons, 2010.
- Addy Pross Theoretical and Physical Principles of Organic Reactivity J. Wiley and Sons, 1995.

NOTA

Italiano

La frequenza alle lezioni è soltanto consigliata, non obbligatoria.

English

To attend the lectures is not mandatory, just advisable.

Pagina web del corso: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?_id=95qf

SINTESI INORGANICHE

Inorganic Synthesis

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	CHI0053
Docente:	Prof. Eliano Diana (Titolare del corso) Dott. Stefano Livraghi (Titolare del corso)
Contatti docente:	011 6707572, eliano.diana@unito.it
Anno:	1° anno
Tipologia:	Di base
Crediti/Valenza:	6
SSD attività didattica:	CHIM/03 - chimica generale e inorganica
Erogazione:	Tradizionale
Lingua:	Italiano
Frequenza:	Obbligatoria
Tipologia esame:	Orale

OBIETTIVI FORMATIVI

Italiano

Progettazione ed esecuzione di sintesi inorganiche utilizzando tecniche avanzate sia in soluzione che allo stato solido. Purificazione e caratterizzazione strutturale e spettroscopica dei composti preparati.

English

The course provides an introduction to modern concepts and experimental techniques in solid state and molecular inorganic chemistry. The lectures emphasize the specific experimental techniques required for the laboratory as well as the inorganic and organometallic principles that are the foundation of the experiments being performed. Experiments emphasize protocols that showcase important inorganic and organometallic reaction mechanisms and modern laboratory techniques used routinely in synthetic research and development laboratories.

RISULTATI DELL'APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano

Acquisizione delle corrette procedure sintetiche e di caratterizzazione caratteristiche della chimica inorganica.

English

Students are expected to acquire knowledge of synthetic procedures and characterization techniques in the domain of solid state and molecular inorganic chemistry

MODALITA' DI INSEGNAMENTO

Italiano

Il corso prevede una serie di lezioni frontali (2CFU) in cui verranno illustrate in dettaglio le esperienze previste in laboratorio, i protocolli di sintesi e le relative misure di sicurezza da adottare. Verranno inoltre approfonditi argomenti inerenti le tecniche di caratterizzazione e i meccanismi di reazione coinvolti nelle sintesi. La parte di laboratorio (4 CFU) riguarderà l'attività pratica di sintesi e caratterizzazione.

English

The course is based on classical frontal lectures (2CFU) where the synthetic procedures and relative characterization techniques will be treated in detail. Lab sections will be devoted to the synthesis of molecular and solid state inorganic compounds.

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano

Relazione in forma di presentazione delle esperienze svolte nel corso del laboratorio. Lo studente presenterà in forma orale una delle esperienze svolte approfondendo la bibliografia relativa. Verrà valutata i) la capacità di identificare il problema scientifico; ii) la capacità di identificare e razionalizzare i dati sperimentali; iii) la capacità di discussione dei risultati e la formulazione di conclusioni; iv) la capacità espositiva e il grado di elaborazione personale e v) il grado di comprensione della materia.

English

The exam consists in the oral presentation of one of the synthesis carried out in the lab. Students are expected to explore the scientific literature relative to the chosen subject. The evaluation will be based on i) the recognition of the scientific problem; ii) the identification of evidence; iii) the drawing of conclusions; iv) the communication of these conclusions; and v) the demonstration of understanding of the scientific concepts.

PROGRAMMA

Italiano

Tecniche di sintesi in atmosfera controllata. Richiami di spettroscopia vibrazionale (IR e Raman) ed elettronica applicate alla chimica inorganica, cenni di chimica dello stato solido, richiami di diffrazione di raggi X di polveri e riflettanza diffusa.

La prima parte del laboratorio consiste nell'esecuzione di un progetto sintetico e di caratterizzazione di complessi metallici, a scelta fra queste due esperienze:

-Sintesi del $[\text{Cr}(\text{phen})_3]^{3+}$, risoluzione dei suoi enantiomeri, caratterizzazione tramite polarimetria e spettroscopia di dicroismo circolare. Studio di una reazione di foto-ossidazione attraverso spettrofluorimetria.

oppure

-Sintesi e caratterizzazione spettroscopica di un complesso con legame metallo-metallo quadruplo: $[\text{Mo}_2\text{Cl}_8]^{4-}$ e suoi derivati fosfinici.

La seconda parte del laboratorio verte su:

Tecniche di sintesi di solidi inorganici: sol-gel, metodo idrotermale, reazione chimica da fase vapore (CVR).

Sintesi di ossidi semiconduttori (TiO_2). Modificazione delle proprietà ottiche, magnetiche ed elettroniche tramite drogaggio con etero elementi.

Reattività all'interfaccia superficie-gas e fotochimica di superficie.

Caratterizzazione mediante BET, XRD di polvere, spettroscopia EPR e UV-Vis.

English

Techniques for handling air sensitive compounds. Vibrational (IR e Raman) and electronic spectroscopies applied to the characterization of inorganic compounds. Basics of solid state chemistry, XRD powder diffraction and diffuse reflectance. Sol-gel chemistry, hydrothermal methods, chemical vapor reaction.

The first part of the laboratory consists in the execution of a synthetic project and the characterization of metal complexes, by choice between:

-Synthesis of $[\text{Cr}(\text{phen})_3]^{3+}$, resolution of his enantiomers, characterization by means of polarimetry, circular dichroism. Study of a reaction of photo-reduction by spectrofluorimetry.

or

-Synthesis and spectroscopic characterization of a complex with quadruple metal-metal bond: $[\text{Mo}_2\text{Cl}_8]^{4-}$ and his phosphine derivatives.

The second part of the laboratory concerns:

Synthesis and doping of semiconducting oxides (TiO_2)

Surface reactivity and fotochemistry.

licates

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

Italiano

RUREN XU, WENQIN PANG, QISHENG HUO, Modern inorganic synthetic chemistry, Elsevier

Articoli su rivista forniti dai docenti

English

RUREN XU, WENQIN PANG, QISHENG HUO, Modern inorganic synthetic chemistry, Elsevier

Litterature articles provided by the instructors

Pagina web del corso: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?_id=1dmn

STRATEGIE ANALITICHE

ANALYTICAL STRATEGIES

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	CHI0061
Docente:	Dott. Silvia Berto (Titolare del corso) Prof. Alessandra Bianco Prevot (Titolare del corso)
Contatti docente:	0039 011 6705279, silvia.berto@unito.it
Anno:	1° anno 2° anno
Tipologia:	Caratterizzante
Crediti/Valenza:	6
SSD attività didattica:	CHIM/01 - chimica analitica
Erogazione:	Tradizionale
Lingua:	Italiano
Frequenza:	Facoltativa
Tipologia esame:	Orale

PREREQUISITI

Italiano

Conoscere i principi che regolano gli equilibri chimici e i fondamenti della chimica analitica strumentale. Per l'esecuzione del laboratorio è opportuno che gli studenti siano a conoscenza della pratica di base per l'attività caratteristica del laboratorio analitico.

English

The knowledge of the principles governing chemical equilibria and the basis of instrumental analysis. In order to perform properly the laboratory activities it is required that students know the basic practice of the analytical laboratory.

OBIETTIVI FORMATIVI

Italiano

L'obiettivo prioritario è centrato sullo sviluppo della capacità di scelta in campo analitico. L'ottimizzazione di una strategia analitica deve temperare un bilancio realistico tra lo scopo dell'analisi, il tempo, i costi e i mezzi a disposizione. Lo scopo dell'analisi (analisi di tracce, analisi di screening, analisi merceologica di routine, analisi clinica, ecc.) guida i criteri di scelta di ogni fase analitica e impone le modalità di presentazione del risultato analitico. Un ulteriore obiettivo riguarda l'ampliamento della latitudine culturale generale, con riferimento particolare a tutti gli aspetti della chimica che è importante saper richiamare e padroneggiare per ottimizzare una strategia di analisi mirata e corretta.

English

The main mission is to develop the skill to choose the best way to perform the analytical measurements. The optimization of the analytical strategy has to take into account many aspects, such as the objective of the analysis, the working time, the budget and the laboratory instruments. The choice of the analytical procedures and the management of the analytical results are determined by the objective of the analysis (trace analysis, screening analysis, routine analysis, clinical analysis, etc.). A second mission is the widening of the chemistry culture of the students, with particular attention to the chemical knowledge required to plan a good analytical procedure.

RISULTATI DELL'APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano

Al termine dell'insegnamento lo studente dovrà dimostrare di essere in grado di scegliere il metodo analitico più opportuno per raggiungere lo scopo prefissato, in particolare: i) individuare le modalità di trattamento del campione in funzione della tipologia di matrice e della natura dell'analita; ii) identificare la tecnica più opportuna per la quantificazione dell'analita e iii) saper tenere nel giusto conto l'instaurarsi di equilibri chimici nell'esecuzione della procedura analitica. Al termine dell'attività di laboratorio gli studenti dovranno inoltre essere in grado di valutare la qualità del risultato analitico ottenuto.

English

At the end of the course the student have to be able to choose the analytical method more suitable to achieve the goals and in particular: i) choose the pretreatment procedure in function of the nature of the sample; ii) identify the suitable analytical method and iii) to be able to take into consideration the effect of chemical equilibria on the analysis execution. At the end of the laboratory the students have to be able to correctly evaluate the quality of the analytical result.

MODALITA' DI INSEGNAMENTO

Italiano

La metodologia didattica impiegata consiste in lezioni frontali (CFU 3; N. ore 24) e in pratica di laboratorio (CFU 3; N. ore 48). La partecipazione alle lezioni è facoltativa, mentre si richiede la partecipazione obbligatoria ad almeno l'80% delle ore di laboratorio. Si organizzano, inoltre, incontri con gli studenti, prope de utici all'attività di laboratorio, in cui si assegnano ai vari gruppi di lavoro le esperienze da eseguire in laboratorio e si invitano gli studenti a preparare un piano di lavoro.

English

The teaching method used consists of lectures (3 CFU; 24 Hours) and in laboratory practice (3 CFU; 48 Hours). The participation to the lectures is optional, while the participation to the 80% of the hours of the laboratory is mandatory. Some meetings with the students are organized in order to assign the activities to the working groups. Each group is invited to plan the laboratory doings before to start the activities.

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano

La verifica dell'apprendimento avverrà con la compilazione di una relazione scritta sull'attività di laboratorio e con lo svolgimento di una prova orale. La relazione scritta dovrà essere consegnata con qualche giorno d'anticipo rispetto alla data d'esame. Il voto sarà espresso il trentesimi.

VALUTAZIONE DEL LABORATORIO. A conclusione delle esercitazioni in laboratorio gli studenti sono tenuti a compilare in modo dettagliato una relazione sull'attività svolta e sui risultati analitici ottenuti. Si richiede la valutazione della qualità dei dati ottenuti e l'esame critico dell'intera procedura analitica. Il giudizio complessivo di laboratorio, formulato in base alla valutazione dell'elaborato scritto, potrà essere integrato e modificato in base all'esito della successiva prova orale.

PROVA ORALE. Durante la prova saranno verificate le conoscenze dello studente riguardo le modalità analitiche proposte a lezione e sarà verificata la sua capacità di illustrare l'attività di laboratorio. Verrà richiesto allo studente di elaborare in modo critico sia le informazioni ricevute, sia i risultati ottenuti in laboratorio. Durante il colloquio sarà implicitamente richiesto di fare riferimento agli argomenti riportati nei prerequisiti.

English

The evaluation of the learning process will take place with the compilation of a laboratory report and with an oral test. The report must be submitted to the teachers with a few days in advance of the exam date. The evaluation will be expressed out of thirty.

LABORATORY EVALUATION. At the conclusion of the laboratory students are required to complete a detailed report on their activities and on the analytical results obtained. The students have to submit an opinion about the quality of the data obtained and have to critically expose the entire analytical procedure. The evaluation of the laboratory report will be supplemented and amended in light of the results of the oral test.

ORAL TEST. During the test the student's knowledge about the analytical methods presented during the lessons and their ability to illustrate the activities of the laboratory will be checked. The student's ability to critically elaborate the information received and the results obtained will be also tested. During the interview the teachers can ask the student to refer to the items listed in the prerequisites.

ATTIVITÀ DI SUPPORTO

Italiano

Al termine del percorso di insegnamento si organizza un seminario nel quale gli studenti possono esporre ai colleghi e ai docenti le procedure analitiche utilizzate e i risultati ottenuti in laboratorio. I docenti saranno a disposizione degli studenti, previa richiesta di appuntamento, sia nella fase di preparazione del laboratorio, sia nella fase di elaborazione critica dell'attività svolta, propedeutica alla preparazione della relazione scritta.

English

A seminar is organized at the end of the course in which the students can explain the analytical procedure adopted during the laboratory and can present the results obtained. The teachers will be available to students to help them in the preparation of the laboratory activities and in the critical elaboration of the analytical results necessary for the compilation of the laboratory report.

PROGRAMMA

Italiano

Studio dei criteri di scelta che guidano l'impostazione di un'analisi chimica in funzione della specifica finalità (analisi di tracce, analisi di screening, analisi merceologica di routine, analisi clinica, ecc.) su matrice reale inorganica o organica. Definizione delle fasi di cui si compone il processo analitico. Descrizione dei metodi di campionamento in funzione dell'obiettivo analitico e della natura del campione. Approfondimento delle tecniche di trattamento del campione: estrazione con solvente, estrazione in fase solida, processi di dissoluzione del campione, trattamento di composti volatili. Analisi di speciazione: valutazione della concentrazione di analiti in equilibrio e concetto di speciazione chimica. Abbinamento di metodi di misurazione che non perturbano lo stato d'equilibrio del campione e di tecniche di simulazione che forniscono, come output di calcolo, il risultato analitico d'interesse. Procedura per la valutazione della qualità del dato analitico. Analisi in laboratorio su matrici reali con sviluppo e messa a punto dell'intera procedura analitica, elaborazione dei dati ed espressione del risultato.

L'articolazione del programma prevede dunque la trattazione dei seguenti argomenti:

- Criteri per lo sviluppo di strategie di chimica analitica
- Metodi di campionamento
- Metodi di trattamento del campione
- Selezione di analisi chimiche applicate rappresentative
- Analisi di equilibri multi-componente

- Qualità delle misure ed espressione dei risultati
- Laboratorio analitico su campione reale ed elaborazione dei dati ottenuti

English

Evaluation of the criteria employed to plan a chemical analysis as a function of a specific target (trace analysis, screening analysis, routine analysis, clinical analysis, and so on) on real organic or inorganic matrices. Definition of the steps of an analytical process. Description of the sampling techniques. Deepening of the sample pretreatment procedures: liquid and solid extraction, sample dissolution, treatment of volatile compounds. Examples will be developed (lessons and laboratory) considering specific analytes in real matrices as: water, steels, and alcoholic beverages. Speciation analysis: concentration evaluation of analytes in chemical equilibrium. Selection of those analytical methods which does not alter the chemical equilibrium and hyphenation with simulation computing techniques to obtain, as an output calculation, the required equilibrium concentration of the species under analysis. Laboratory analysis of real matrices with a partial autonomy in the analytical procedure development.

The program will be shared in the chapters reported below:

- Criteria to develop analytical chemistry strategies
- Sampling techniques
- Methods of sample treatment
- Selection of representative applied chemical analysis
- Multi-components equilibrium analysis
- Expression of results
- Laboratory analysis of real matrices and data elaboration.

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

Italiano

Il materiale didattico presentato a lezione è disponibile presso i docenti.

English

The teaching materials presented during the lessons will be supplied by the teachers.

Pagina web del corso: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?_id=cle5

STRUTTURISTICA

Structural Chemistry

Anno accademico:	2017/2018
Codice attività didattica:	CHI0054
Docente:	Prof. Piero Ugliengo (Titolare del corso)
Contatti docente:	+39-011-6704596, piero.ugliengo@unito.it
Anno:	1° anno 2° anno
Tipologia:	Caratterizzante
Crediti/Valenza:	6
SSD attività didattica:	CHIM/02 - chimica fisica
Erogazione:	Tradizionale
Lingua:	Italiano
Frequenza:	Obbligatoria
Tipologia esame:	Scritto

PREREQUISITI

Italiano

Buone basi di fisica, matematica e chimica fisica (analisi differenziale, algebra matriciale, serie e trasformate di Fourier, struttura atomica, legame chimico, conoscenza di tecniche spettroscopiche di indagine). I concetti matematici fondamentali, quali le serie di Fourier, le trasformate di Fourier, la delta di Dirac e alcuni passaggi di algebra matriciale vengono richiamati nel corso per permettere una coerenza formale.

English

The student should have acquired basic background in physics, mathematics and physical chemistry (differential calculus, matrix algebra, series and Fourier transformation, atomic structure, chemical bond and main spectroscopic techniques). More specific mathematical concepts like Fourier series and transformation, Dirac delta function and some specific matrix algebra calculations will be reintroduced in the course to keep formal coherence.

PROPEDEUTICO A

Nessuna propedeuticità

OBIETTIVI FORMATIVI

Italiano

Illustrare allo studente quali sono gli approcci moderni per la determinazione della struttura molecolare a risoluzione atomica. Lo studente acquisirà conoscenze sulle proprietà della materia cristallina e sulla sua interazione con radiazione-x. Lo studente dovrà comprendere la letteratura moderna nella quale l'informazione strutturale è di importanza fondamentale (biochimica, scienza dei materiali, catalisi). Lo studente dovrà inoltre essere capace di rappresentare l'informazione strutturale proveniente da database cristallografici mediante opportuni programmi di grafica molecolare.

English

To show to the student what is the modern approach for the determination of the molecular structure with atomic resolution. The student will acquire the basic concepts on matter in the crystalline state and on the interaction between crystals and x-ray radiation. The student should be able to understand the modern literature in which structural information is the key factor (biochemistry, material science,

catalysis, etc.). He/she will also be able to visualize with proper graphical tools the structural data from crystallographic databases.

RISULTATI DELL'APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano

Al termine dell'insegnamento lo studente dovrà essere in grado di:

- 1) conoscere i fondamenti della cristallografia geometrica tra cui i concetti di: reticolo cristallino, simmetria reticolare, gruppi punto e spaziali in 2D e 3D, struttura cristallina, piani cristallografici, indici di Miller, tensore metrico, matrici di ortonormalizzazione, rappresentazione matriciale degli operatori di simmetria.
- 2) conoscere le basi della interazione tra raggi-X e materia cristallina, tra cui concetti quali: descrizione di un'onda, principio di sovrapposizione, interferenza e diffrazione delle onde.
- 3) conoscere le leggi della diffrazione dei raggi-X da parte dei cristalli, quali le equazioni di Ewald, la legge di Bragg.
- 4) conoscere i metodi di soluzione della struttura cristallina, quali: il metodo di Patterson, il metodo dell'atomo pesante, la sostituzione isomorfa, i metodi diretti.
- 5) capacità di accedere ai principali database strutturali (organici, inorganici e biologici) per estrarre informazione strutturale preesistente di cui valutare la bontà nella determinazione strutturale
- 6) capacità di utilizzare i più comuni programmi di grafica molecolare (MOLDRAW e JMOI) per rappresentare e manipolare la struttura di molecole, slabs e cristalli provenienti da articoli e database strutturali (vedi punto 5))

English

At the end of the course the student should be able to:

- 1) understand concepts about the foundation of crystallography like: crystalline lattice, lattice symmetry, point and space groups in 2D and 3D, crystal structure, crystallographic planes, Miller indexes, metric tensor, orthonormalization matrices, matrix representation of symmetry operators.
- 2) understand concepts related to the foundation of the interaction between x-rays and crystals like: mathematical representation of waves, wave superposition principle, interference and diffraction of waves.
- 3) understand the laws of the x-ray diffraction by crystals like: the Ewald equations and the Bragg law.
- 4) understand the methods to solve a crystal structure, like: the Patterson method, the heavy atom method, the isomorphous substitution and the direct methods.
- 5) ability to use main structural databases (organic, inorganic and biological repositories) to extract literature structural information and evaluate the accuracy of the structural determination.
- 6) ability to use most common molecular graphical programs (MOLDRAW e JMOI) to represent and manipulate structures of molecules, slabs and crystals from literature papers and databases (see point 5)).

MODALITA' DI INSEGNAMENTO

Italiano

L'insegnamento viene erogato in forma tradizionale con lezioni frontali.

Le lezioni vengono svolte alla lavagna con lo svolgimento dei passaggi matematici e non viene fatto ricorso a proiezioni con Powerpoint.

Lo scopo è trasmettere una metodologia di soluzione di problemi di interesse cristallografico mediante una serie razionale di elaborazioni formali.

Si svolgeranno alcune sessioni esercitative al

calcolatore mirate a sviluppare capacità nel reperimento dell'informazione strutturale da banche dati cristallografiche

e alla loro visualizzazione mediante programmi di grafica molecolare.

English

The classes are taught by a classical approach based on lessons at the blackboard.

All mathematical details will be reported at the blackboard and no recourse to PowerPoint is usually made. The purpose is to teach the proper methodology to arrive at the results through formal

and rigorous mathematical steps. Few classes will be devoted to

do computer exercises focused on searching for structural information from structural data bank and on the visualization through molecular graphic programs.

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano

Durante lo svolgimento dell'insegnamento si svolgeranno mini-presentazioni degli studenti in lingua inglese atte a descrivere un articolo a carattere strutturale da cui estrarre i dati strutturali e a darne una rappresentazione grafica.

L'esame finale si svolge in forma scritta. Lo scritto consiste di 20 domande aperte che mirano a verificare i risultati dell'apprendimento attesi. Le domande riguardano i principali concetti illustrati e discussi nell'insegnamento.

La valutazione dell'elaborato è globale e, anche se viene assegnato un punteggio per ogni esercizio tra 0-2 punti, si valuterà:

- 1) la chiarezza espositiva dei concetti con un peso al linguaggio utilizzato
- 2) la gravità degli errori compiuti relativamente alla loro importanza rispetto ai risultati dell'apprendimento attesi.

Per esempio, verrà dato molto peso ad

errori concettuali sulle leggi fondamentali della cristallografia o sui fondamenti delle metodologie di risoluzione strutturale. La valutazione dell'elaborato è sempre motivata allo studente con il commento puntuale degli errori commessi.

English

Mini-talks in English are planned in which students are asked to read and understand a scientific paper with structural content from which extract and represent structural information through molecular graphic programs. The final exam is in a written form and consists of 20 open questions

devoted to check the student's learning of the basic concepts. The questions

focus on the main concepts explained in the classes. Each question scores 0-2 points. However, the evaluation of the exam

is not based on a rigid arithmetic scheme. Rather, the final score is the results of an integrated evaluation where questions can have different weight in the final score based on the importance of the concepts. The evaluation is based on:

- 1) clarity in presenting concepts and methods with emphasis on the language style.
- 2) relative importance of the errors in answering fundamental concepts with respect to the expected learning targets.

For example, conceptual errors on fundamental laws of crystallography or on foundations of the structural solution methods are more serious than other minor flaws. The evaluation of the written exam is critically discussed with the student to make comments on specific points.

ATTIVITÀ DI SUPPORTO

Italiano

Il docente è disponibile a discutere, spiegare e commentare gli argomenti trattati a lezione in qualunque momento.

English

The teacher is available to discuss, explain or comment any topics previously discussed in class.

PROGRAMMA

Italiano

Il corso fornisce le basi per comprendere come si possa arrivare alla conoscenza accurata della struttura molecolare con un approccio sperimentale. Partendo dai concetti fondamentali di cristallografia geometrica si passa a studiare dettagliatamente il fenomeno della interazione tra sistemi cristallini e raggi-X. L'interpretazione di questi esperimenti tramite un approccio matematico (si utilizzano le serie e le trasformate di Fourier) porterà a comprendere come si possano determinare le posizioni atomiche all'interno dei cristalli con grande accuratezza.

Stati della materia. Anisotropia. Significato di ordine. Equilibrio termico. Stato solido: ordine o disordine? Stato amorfo.

Elementi di cristallografia geometrica. Reticolo monodimensionale. Elementi di simmetria 1D. Stato cristallino 2D. Elementi di simmetria 2D. Reticolo Tridimensionale. Tensore metrico. Matrici di ortonormalizzazione. Rappresentazione matriciale degli operatori di simmetria. Descrizione matematica delle onde elettromagnetiche. Principio di sovrapposizione. Interferenza e diffrazione.

Generazione e definizione di raggi-x. Interazione raggi-x materia. Diffrazione da parte di un reticolo 3D finito.

Figure di diffrazione di un reticolo 3D finito. Diffrazione di un reticolo 3D infinito. Equazioni di Laue.

Analogie con l'ottica classica. Limiti sperimentali. Legge di Bragg.

Cerchio (2D) e sfera (3D) di Ewald. Reticolo reciproco e diffrazione. Metodo delle polveri (Debye-Scherrer).

Diffusione di raggi-x da una distribuzione di elettroni. Figura di diffrazione del motivo strutturale.

Sintesi di Fourier. Simmetria della figura di diffrazione. Legge di Friedel. Assenze sistematiche.

Funzioni di Patterson e struttura cristallina. Forma della funzione di Patterson. Significato della funzione di Patterson. Metodi di soluzione basati sulla funzione di Patterson. Mappe di Patterson.

I metodi di soluzione. Metodo dell'atomo pesante. Caso centro e non-centro simmetrico.

Metodi diretti (solo teoremi fondamentali).

Metodi per l'affinamento delle strutture cristalline. Affinamento di Fourier ciclico.

Sintesi di Fourier differenza. Metodo dei minimi quadrati (solo cenni). I database strutturali (CSD, ICSD e PDB) e reperimento dell'informazione strutturale. I programmi di grafica molecolare (MOLDRAW e JMOI) per la visualizzazione e manipolazione dei dati strutturali.

English

The classes provide the conceptual base to understand how to get accurate molecular structures from an experimental

approach. Starting from foundation of geometrical crystallography it then addresses the interaction between crystals and

x-ray. The interpretation of the outcome of these experiments through a mathematical approach (through Fourier series and Fourier

transform) brings to understand how atomic positions in the crystals can be determined with very high precision.

States of the matter. Anisotropy. Meaning of order. Thermal equilibrium. Solid state: order or disorder?

Amorphous state. Elements of geometrical crystallography. Monodimensional lattice. Symmetry elements in 1D.

Crystalline state in 2D. Symmetry elements in 2D. Tridimensional lattice. Metric tensor. Orthonormalization matrices. Matrix representation of symmetry operators.
Mathematical description of electromagnetic waves. Wave superposition principle. Interference and diffraction. Generation and definition of x-ray. Interaction between x-ray and matter. Diffraction by a 3D finite lattice. Diffraction pattern of a finite 3D lattice. Diffraction by a 3D infinite lattice. Laue equations.
Analogies with the classical optics. Experimental limits. Bragg law.
Ewald circle (2D) and sphere (3D). Reciprocal lattice and diffraction. Powder method (Debye-Scherrer). X-ray scattering of an electron distribution. Diffraction pattern of the structural motif. Fourier synthesis. Symmetry of the diffraction pattern. Friedel law. Systematic absences. Patterson function and crystalline structure. Shape of the Patterson function. Meaning of the Patterson function. Solution methods based on Patterson function. Patterson maps. The solution methods. The heavy atom method. Presence/absence of the inversion centre. Direct methods (only fundamental theorems). Refinement of crystal structures. Cyclic Fourier refinement. Synthesis of the Fourier difference. Method of the Least square minima. Structural databases (CSD, ICSD and PDB) for the access to atomic coordinates. Molecular graphics programs (MOLDRAW e JMOI) for handling and visualization of crystal structures.

TESTI CONSIGLIATI E BIBLIOGRAFIA

Italiano

Il materiale didattico presentato a lezione è disponibile come file pdf.

P. Ugliengo, Strutturistica Chimica, appunti delle lezioni.

G. Rigault, Introduzione alla Cristallografia, Levrotto e Bella, Torino, 1978.

G. Rigault e G. Graziosi, Complementi ed Esercizi di Cristallografia, Levrotto e Bella, Torino, 1972.

C. Ciacovazzo e altri autori, Fundamentals of Crystallography, Oxford University Press, Oxford, 1992.

Infine sono di seguito indicati alcuni siti internet di interesse:

<http://lcr.epfl.ch/page-6443.html>

<http://escher.epfl.ch/escher/>

<http://www.moldraw.unito.it>

<http://www.jmol.org>

<https://sites.google.com/site/cristallografia/>

English

Teaching material as discussed in the classes is available as a pdf in the Teaching material link.

P. Ugliengo, Strutturistica Chimica, source of classes teaching material.

G. Rigault, Introduzione alla Cristallografia, Levrotto e Bella, Torino, 1978.

G. Rigault e G. Graziosi, Complementi ed Esercizi di Cristallografia, Levrotto e Bella, Torino, 1972.

C. Ciacovazzo e altri autori, Fundamentals of Crystallography, Oxford University Press, Oxford, 1992.

Of particular interest are these link:

<http://lcr.epfl.ch/page-6443.html>

<http://escher.epfl.ch/escher/>

<http://www.moldraw.unito.it>

<http://www.jmol.org>

<https://sites.google.com/site/cristallografia/>

Mutuato da: Non mutuato

Pagina web del corso: http://lmchimica.campusnet.unito.it/do/corsi.pl/Show?_id=1h8b
