

Corso di Laurea Magistrale in CHIMICA

Obiettivi formativi

La Laurea Magistrale in Chimica si propone la formazione di una figura professionale che possieda una solida preparazione culturale nei diversi settori della Chimica unita ad una elevata preparazione scientifica e operativa, una buona padronanza del metodo scientifico di base, una buona conoscenza degli strumenti matematici, fisici e informatici di supporto, una buona padronanza di almeno una lingua dell'Unione Europea oltre l'Italiano. Il laureato magistrale sarà in grado di impostare autonomamente il lavoro nell'ambito della Chimica di base e applicata, anche assumendo responsabilità di progetti o strutture. Tra le attività che il laureato magistrale è in grado di svolgere si indicano in particolare: attività di promozione e sviluppo dell'innovazione tecnologica, nonché gestione e progettazione delle tecnologie chimiche; attività professionali e di progetto in ambiti correlati con le discipline chimiche nei settori dell'industria, dei servizi, dell'ambiente, della sanità, dei beni culturali e della pubblica amministrazione.

Attività formative

Il curriculum del corso di Laurea Magistrale in Chimica comprende attività formative finalizzate all'acquisizione di competenze avanzate in settori specifici della Chimica, che potranno essere sviluppate soprattutto nel periodo di preparazione di una tesi di carattere sperimentale. Attività formative consistenti in lezioni ed esercitazioni di laboratorio, saranno dedicate alla conoscenza di metodiche sperimentali, alla elaborazione dei dati con sistemi informatici, all'uso di strumentazione avanzata. Sarà possibile svolgere tirocini formativi presso aziende, strutture della pubblica amministrazione e laboratori, nonché, su obiettivi specifici, arricchire la formazione culturale e scientifica con soggiorni presso Università italiane e europee, anche nel quadro di accordi internazionali.

Percorsi formativi previsti

Lo studente potrà sviluppare un piano di studi personalizzato costruito sulla base della offerta formativa dal corso di Laurea Magistrale in Chimica.

Tale percorso formativo dovrà comunque essere approvato dal Consiglio di Corso di Laurea secondo l'Ordinamento Didattico vigente.

Sbocchi professionali

Il laureato magistrale in Chimica potrà accedere a Dottorati di Ricerca o a Corsi di Specializzazione nello specifico settore. Il laureato magistrale in Chimica potrà essere inserito nell'industria chimica, farmaceutica, ecc., con mansioni dirigenziali o di alta qualificazione professionale. Potrà inoltre essere inserito nei settori di ricerca presso enti pubblici o privati nonché nei settori Ambientali, dei Beni Culturali, Sanità ecc.

Potrà accedere all'insegnamento negli istituti di istruzione secondaria secondo la normativa vigente.

Iscrizione e debiti formativi

La didattica è articolata per ciascun anno di corso in due cicli di lezioni. Nell'AA 2011-2012 le lezioni del 1° ciclo avranno inizio il 3 ottobre 2011 e avranno termine il 20 gennaio 2012, mentre le lezioni del 2° ciclo avranno inizio il 5 marzo 2012 e avranno

termine il 15 giugno 2012. Altre informazioni sul corso di Laurea Magistrale in Chimica possono essere reperite sulla pagina web del Consiglio di Corso di Laurea in Chimica (www.scienze.uniroma2.it).

Per iscriversi alla Laurea Magistrale in Chimica è necessario essere in possesso di una Laurea triennale in ambito scientifico. I laureati triennali in tutti i corsi di laurea della Classe Chimica, che abbiano aderito al programma Core Chemistry, potranno immatricolarsi senza ulteriori obblighi formativi. Per i possessori di Laurea equivalente conseguita all'estero oppure di Laurea in altro ambito scientifico, il Consiglio di Corso di Laurea stabilirà le modalità di accesso e l'assegnazione di eventuali obblighi formativi, dopo aver analizzato il curriculum universitario del candidato .

Piani di studio

Il CCS approva all'inizio di ogni anno accademico i piani di studio proposti dagli studenti in conformità all'Ordinamento Didattico del Corso di Laurea.

Ordinamento degli Studi - Laurea Magistrale

I°Anno I SEMESTRE

Metodi Matematici per la Chimica	6 CFU
Meccanismi di reazione in Chimica Organica	6 CFU
Chimica Inorganica Avanzata	6 CFU
Chimica Analitica Applicata	8 CFU
Catalisi	6 CFU

I°Anno II SEMESTRE

Spettroscopia Molecolare	8 CFU
Biochimica e Laboratorio	8 CFU
Chimica Teorica	6 CFU
Chimica Fisica Biologica	6 CFU
Chimica Macromolecolare	6 CFU
Chimica dei Materiali	6 CFU
Spettroscopia NMR delle molecole organiche	6 CFU

2°Anno I SEMESTRE

Chimica e Applicazioni di Materiali Molecolari	6 CFU
Chimica Analitica Clinica	6 CFU
Chimica Elementoorganica	6 CFU
Chimica dello stato solido	6 CFU
Enzimologia	6 CFU
Materiali Nanostrutturati	6 CFU
Sintesi asimmetrica	6 CFU
Chimica Elettroanalitica	6 CFU

2°Anno II SEMESTRE

Chimica Combinatoria e Drug Design
Nanoscienze

6 CFU
6 CFU

Programmi dei corsi

BIOCHIMICA E LABORATORIO

8 CFU

Prof. M. Paci

Il corso si svolgerà con lezioni teoriche ed esercitazioni pratiche in laboratorio. Saranno affrontati i seguenti argomenti: aspetti generali della cellula, acidi nucleici e codice genetico, replicazione e trascrizione del DNA, sintesi e degradazione proteica negli eucarioti, aminoacidi e proteine, struttura e funzione delle proteine, motivi strutturali delle proteine, proteine di membrana, trasduzione del segnale ormonale, sistemi sensoriali (trasduzione del segnale visivo), contrazione muscolare, morte cellulare programmata e target proteici per la terapia del cancro, cenni sulla replicazione virale e sulle proteine virali come target terapeutici, matrice extracellulare e cenni di ingegneria tissutale.

Panoramica sulle tecniche di DNA ricombinante: estrazione ed amplificazione del DNA (PCR), sequenziamento DNA, produzione di proteine ricombinanti, tecniche per lo studio dell'espressione genica (Western blott, Microarray), tecniche cromatografiche per la purificazione delle proteine (cromatografia d'affinità, a gel filtrazione, ad interazione idrofoba, a scambio ionico, a fase inversa, sistemi cromatografici HPLC, FPLC), tecniche elettroforetiche per lo studio delle macromolecole biologiche (elettroforesi nativa in gel di poliacrilammide, SDS-PAGE, elettroforesi in gel d'agarosio, isolettrofocusing, elettroforesi capillare). Utilizzo di banche dati e di programmi per la ricerca di similarità e per la predizione delle strutture secondaria e terziaria delle proteine.

CATALISI

6 CFU

Prof. P. Tagliatesta

Concetti generali

I complessi dei metalli di transizione. Teorie VB ed MO applicate ai complessi. Complessi organometallici. Regola dei 18 elettroni e sue deroghe. Gli idruri: preparazioni ed uso.

I composti carbonilici: preparazioni ed uso. I composti alchilici: preparazioni e reazioni.

Le fosfine: uso e caratteristiche. Reazioni di sostituzione di ligando. Addizione ossidativa e meccanismi. Eliminazione riduttiva. Accoppiamento ossidativo ed estrusione riduttiva. Inserzioni E1 ed E2. Le eliminazioni a, b, g, d. Addizioni ed eliminazioni nucleofile ed elettrofile. Composti polienici e polienilici.

Catalisi omogenea industriale

Catalizzatori solubili ed insolubili. Reazioni organometalliche. Idrogenazione selettiva. Idrogenazione stereoselettiva: meccanismo. Idrosililazione e idrocianazione. Isomerizzazione di alcheni. Polimerizzazione di alcheni. Oligomerizzazione di alcheni. Polimerizzazione ed oligomerizzazione di dieni lineari. Processo water shift gas. Idrocarbonilazione di alcheni.

Carbossilazione di Reppe. Carbonilazione di alcoli. processo Monsanto. Idrogenazione di CO.

Carbonilazione dell'ammoniaca. Accoppiamento ossidativo di CO. Reazione di Fisher-Tropsch. Processo Wacker. Epossidazione di alcheni.

Catalisi eterogenea

Adsorbimento e chemisorbimento. Catalisi industriale per la idrogenazione e la sintesi della ammoniaca. Meccanismo.

CHIMICA ANALITICA APPLICATA

8 CFU

Prof. G. Palleschi

Equilibri in soluzione

Equilibri Acido Base

Dissociazione acidi e basi deboli

Forza ionica

Tamponi
Risoluzione di problemi applicati agli equilibri acido base
Equilibri di precipitazione
Solubilità, prodotti di solubilità
Precipitazione frazionata e applicazioni in chimica analitica
Combinazioni di costanti di equilibrio
Risoluzione di problemi applicati agli equilibri di precipitazione
Equilibri di complessazione
Costanti di stabilità
Effetto della complessazione sulla solubilità
Effetto del pH
Risoluzione di problemi applicati agli equilibri di complessazione
Equilibri di ossidoriduzione
Potenziali elettrodi
Fattori che influenzano il potenziale
Equazione di Nernst
Celle galvaniche
Costanti di equilibrio redox
Applicazione dei potenziali standard e dell'equazione di Nernst
Risoluzione di problemi applicati agli equilibri redox.

ESERCITAZIONI

Esercitazioni di laboratorio su tecniche strumentali analitiche utilizzate per le attività di ricerca ove si evidenziano gli studi degli equilibri descritti. (ripassare le tecniche strumentali studiate ad analitica 3)

Preparazione di una tesina sulle esercitazioni svolte da portare all'esame insieme al programma teorico

CHIMICA ANALITICA CLINICA

6 CFU

Prof.ssa D. Moscone

CHIMICA COMBINATORIALE E DRUG DESIGN

6 CFU

Docente da definire

- 1) Drug Target
 - Enzimi
 - Recettori....
- 2) Principi di Farmacocinetica (ADMET)
- 3) Progettazione di SM (small molecules)
 - Relazioni Struttura-Attività SAR,
 - Interazione drug-target
 - Definizione di Farmacoforo,
 - Isosteria/Bioisosteria
 - Strategie di lead optimization (case histories)
- 4) Computer Aided Drug Design (CADD)
 - Costruzione di Modelli Farmacoforici
 - Docking
 - Homology modeling
 - Virtual screening of database
 - QSAR
 - Valutazione/predizione delle proprietà ADMET in silico
- 5) Approccio combinatoriale al Drug Discovery

CHIMICA DEI MATERIALI

6 CFU

Dr. R. Polini

Parte generale:

Strutture cristalline.

Solidi cristallini. Reticoli di Bravais. Indici di Miller. Strutture cristalline dei materiali metallici. Strutture compatte (fcc, hcp). Strutture dei solidi ionici. Strutture di CsCl, NaCl, ZnS, fluorite, TiO₂, spinelli, perovskiti.

Difetti. Difetti puntuali. Conduttività ionica. Elettroliti solidi. Difetti di linea: dislocazioni, vettore di Burgers, sistemi di scorrimento, interazioni tra dislocazioni, interazioni dislocazioni-difetti puntuali.

Difetti di superficie: difetti di impilamento (stacking faults), geminazione (twins), bordi di grano, bordi di grano a basso angolo. Difetti di volume: inclusioni, precipitati, porosità.

Proprietà meccaniche dei materiali. Comportamento elastico lineare. Modulo di Young. Coefficiente di Poisson. Curva sforzo-deformazione: snervamento, deformazione plastica, incrudimento, carico di rottura, duttilità. Tenacità. Resilienza.

Durezza. Meccanismi di rafforzamento dei materiali metallici.

Legge di Hall-Petch. Fatica. Scorrimento viscoso (creep).

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

Proprietà meccaniche dei materiali ceramici. Frattura fragile. Teoria di Griffith.

Comportamento a frattura in termini statistici (Weibull). Materiali polimerici. Polimeri amorfi e semi-cristallini. Temperatura di transizione vetrosa. Comportamento viscoelastico

Reticolazione (cross-linking).

Parte specialistica:

Processi di sinterizzazione di polveri: principi fondamentali. Equazione di Laplace. Stadi della sinterizzazione. Evoluzione della microstruttura. Tecniche di misura del grado di avanzamento della sinterizzazione. Additivi di sinterizzazione: principi di funzionamento. Sinterizzazione con fase liquida. Diagramma di German. Processi di sinterizzazione pressure-assisted (HIP). Case study: la sinterizzazione del carburo di tungsteno cementato (WC-Co).

Rivestimenti avanzati da fase vapore. Processi di deposizione fisica (PVD):

evaporazione, sputtering, magnetron sputtering, processi ad arco, arco filtrato. Processi di deposizione chimica da vapore (CVD). CVD termico, CVD assistito da plasma, Hot Filament CVD. Parametri di processo, microstruttura dei rivestimenti e proprietà. Case study: deposizione di film di diamante micro-e nano-strutturati.

Materiali ceramici per celle a combustibile a ossidi solidi (SOFC): scelta, proprietà e processing.

TESTI CONSIGLIATI

Agli studenti saranno fornite copie dei lucidi proiettati a lezione. Gli studenti possono integrare la preparazione mediante la consultazione dei seguenti testi:

Parte generale

William D. Callister, Jr., "Scienza e Ingegneria dei materiali. Una Introduzione"; Edises, Napoli (2002).

William F. Smith, "Scienza e tecnologia dei materiali"; McGraw-Hill Libri Italia srl, Milano (1995).

Anthony R. West, "Solid State Chemistry and its applications", John Wiley & Sons, UK (1984).

Parte specialistica

Randall M. German, "Sintering theory and practice", John Wiley & Sons, Inc., USA (1996).

Milton Ohring, "Material Science of Thin Films. Deposition and Structure", Academic Press, San Diego (CA), USA (2002).

Roitan F. Bunshah, "Handbook of Deposition Technologies for Films and Coatings.

Science, Technology and Applications", 2^a edizione, Noyes Publications, Westwood (New Jersey), USA (1994).

N. Q. Minh, "Ceramic Fuel Cells", J. Am. Ceram. Soc., 76(1993) 563-588.

CHIMICA DELLO STATO SOLIDO

6 CFU

mutuato dall'insegnamento di "Solidi I." cdl in Scienza dei Materiali

Prof. M. Tomellini

Reticoli cristallini. Reticolo reciproco. Indici di Miller. La diffrazione dei raggi X: formule di Bragg e di Von Laue. Intensità di diffrazione. Diffrazione da un reticolo con base. Proprietà termiche dei solidi. Equazione di stato. Coesione dei solidi ionici, dei metalli e dei cristalli di gas nobili. Stabilità delle strutture di: NaCl, CsCl e ZnS. Termodinamica dei difetti di punto. Equilibri tra

difetti e reazioni gas-solido. Ossidi semiconduttori. Trasporto di materia nei solidi. Leggi di Fick. Equazioni di trasporto generalizzate. Coefficiente di diffusione chimico. Equazione di Nernst-Einstein. Sensori elettrochimici a stato solido. Cinetica di ossidazione dei metalli. Teoria di Wagner.

CHIMICA E APPLICAZIONI DI MATERIALI MOLECOLARI

6 CFU

Docente da definire

CHIMICA ELETTROANALITICA

6 CFU

Dr. F. Ricci

Il corso fornisce agli studenti un approfondimento delle conoscenze di chimica elettroanalitica acquisite nei precedenti corsi di chimica analitica. Saranno affrontati i principi teorici alla base delle tecniche amperometriche, polarografiche, voltammetriche e potenziometriche. Verranno discusse le principali tecniche utilizzate nelle analisi quantitative con particolare riferimento ad applicazioni pratiche. Il corso sarà affiancato da alcune esercitazioni in laboratorio.

CHIMICA ELEMENTO ORGANICA

6 CFU

Prof.ssa B. Floris

Il corso presenterà gli aspetti più significativi e più recenti della Chimica Organica dei metalli del "main group" (Composti organici di litio, magnesio, zinco, boro, silicio e stagno), dei metalli di transizione (Composti organici di rame, titanio, ferro, palladio e lantanidi) e di elementi come zolfo, selenio e fosforo.

CHIMICA INORGANICA AVANZATA

6 CFU

Dr.ssa C. Crestini

CHIMICA FISICA BIOLOGICA

6 CFU

Prof. A. Palleschi

Proprietà strutturali di biopolimeri.

Transizioni *helix-coil* in polipeptidi ed in proteine.

Modelli di *binding*: non cooperativo e cooperativo.

Catalisi enzimatica: modelli interpretativi; cinetiche iperboliche; cinetiche sigmoidali.

Approfondimenti: processi diffusivi; stechiometria di *binding* (Job's Plot).

Termodinamica dei processi irreversibili: principi generali; relazioni di Onsager; processi accoppiati; ordine generato da processi lontani dall'equilibrio.

CHIMICA MACROMOLECOLARE

6 CFU

Prof. G. Paradossi

Classificazioni. Peso molecolare e sua distribuzione. Temperatura della conformazione α di transizione vetrosa. Meccanismo di polimerizzazione a stadi. Nylons e poliesteri. Teoria di Carothers. Meccanismi a catena. Polimerici vinilici. Tecnologie di polimerizzazione radicalica. Tatticità. Il problema della conformazione di una catena statistica. Distribuzione gaussiana. Rappresentazione vettoriale di una catena polimerica disordinata. Rapporto caratteristico. Elemento di Kuhn. Termodinamica del mescolamento in soluzioni polimeriche. Teoria di Flory – Huggins. Precipitazione frazionata. Frazionamento per esclusione di dimensioni. Pressione osmotica. Fluttuazioni termodinamiche in soluzioni polimeriche. Teoria di Rayleigh. Light Scattering e dipendenza angolare. Light scattering dinamico. Termodinamica dell'elastomero e teoria dell'elasticità.

Testo consigliato: Introduction to Polymers. CRC Ed.

Dispense di "Chimica delle Macromolecole"

CHIMICA TEORICA

6 CFU

Dr. A. Amadei

Stati fisici ed osservabili in meccanica classica e meccanica quantistica; gli stati quantistici e gli operatori; la rappresentazione delle coordinate e l'uso di basi discrete; le equazioni di Schroedinger e l'equazione di Dirac; distribuzioni di equilibrio e gli ensemble meccanico-statistici; le basi della meccanica statistica di equilibrio; approssimazione Born-Oppenheimer; equazioni del moto e spazio delle fasi; teoria delle perturbazioni e basi della dinamica molecolare; calcoli meccanico-statistici e dinamica molecolare; meccanica statistica di non equilibrio nel regime lineare; trattazione dei processi di assorbimento ed emissione dei fotoni; la teoria del complesso attivato; introduzione ai calcoli misti classico-quantistici.

ENZIMOLOGIA

6 CFU

Prof.ssa Caccuri

MATERIALI NANOSTRUTTURATI

6 CFU

Insegnamento mutuato dal cdl in Scienza dei Materiali

Prof.ssa M.L. Terranova

Introduzione alle Nanoscienze ed alle nanotecnologie : stato dell'arte e prospettive
Nanomateriali e nanostrutture (0-D, 1-D e 2-D) .

-quantum dots

-nanoparticelle e nanopolveri

-nanocapsule

-materiali nanoporosi

-nanofili e nanofibre

-dendrimeri

-film sottili

Gli approcci : bottom-up e top-down.

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

Caratterizzazioni, proprietà ed applicazioni di importanti classi di materiali, con particolare riferimento ai nanomateriali di Carbonio (grafene, fullereni, nanotubi) ed ossidi.

Nanomateriali per sensoristica

Nanomateriali per celle fotovoltaiche DSSC e plastiche

MECCANISMI DI REAZIONE IN CHIMICA ORGANICA

6 CFU

Prof.ssa B. Floris

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

METODI MATEMATICI PER LA CHIMICA

6 CFU

Prof.ssa E. Prestini

Obiettivo del corso è quello di trasmettere conoscenze avanzate in campo matematico di interesse per gli studi in Chimica. _Argomenti quali Spazi di Hilbert, Funzioni di variabili complessa, Equazioni alle derivate parziali costituiscono un supporto matematico di base. Di argomenti quali Serie e Trasformata di Fourier vengono anche descritte applicazioni in cristallografia e in RMN.

NANOSCIENZE

6 CFU

Prof. M. Venanzi

Fondamenti teorici delle Nanoscienze. Microscopie a scansione ed elettroniche. Metodi di patterning top-down. Costruzione bottom-up di nanostrutture. Elettronica molecolare. Bionanotecnologie.

Il corso sarà integrato da esperienze di laboratorio e seminari su attività di ricerca nel campo delle nanoscienze.

SINTESI ASIMMETRICA

6 CFU

Docente da definire

Introduzione al corso. Definizioni ed esempi di selettività. Metodi per controllare l'enantioselezione. Reazioni stereoselettive del carbonile e di alcheni. Risoluzione cinetica e risoluzione cinetica dinamica. Biocatalisi. Organocatalisi. Sintesi Asimmetrica Industriale.

Principi della catalisi metallica in processi selettivi.

Esempi di processi enantioselettivi metallo calizzati:

Reazioni di idroformilazione, idrogenazione, diidrossilazione, ossidazione, metatesi

SPETTROSCOPIA MOLECOLARE

8 CFU

Prof. L. Stella

Spettroscopia di emissione

Spettroscopia risolta nel tempo

 Laser flash photolysis

 Tempi di vita di fluorescenza

 Anisotropia risolta nel tempo

Spettroscopia con luce polarizzata

 Dicroismo lineare

 Dicroismo circolare

 Anisotropia di fluorescenza

Spettroscopia di singola molecola

 Microscopia di fluorescenza

 Spettroscopia di singola molecola

 Fluorescence Correlation Spectroscopy

Elementi di strumentazione

 Lasers

 Monocromatori

 Rivelatori

Esperienze di laboratorio.

SPETTROSCOPIA NMR DELLE MOLECOLE ORGANICHE

6 CFU

Prof. D.O. Cicero