

MODULO PER LA SCELTA DEGLI INSEGNAMENTI OPZIONALI DEL 2° ANNO DI CORSO (TAB. A)
LAUREA MAGISTRALE IN SCIENZE CHIMICHE LM-54

Il Consiglio Interclasse in Chimica (CICHIM) propone per l'**A.A. 2024-25** gli insegnamenti sotto riportati (Tab. A) come corsi **opzionali affini ed integrativi** da fruire al **II anno di corso** della Laurea Magistrale in Scienze Chimiche LM-54 (in allegato sono riportati i programmi dei corsi). L* student* deve esercitare la **scelta di insegnamenti**, per un minimo di **5 CFU**, compilando il presente modulo e consegnandolo, datato e firmato, al Sig. Gisonda **entro il 1 ottobre 2024**. È anche possibile la consegna via mail inviando il pdf scannerizzato del modulo all'indirizzo giandomenico.gisonda@uniba.it. **Possono presentare domanda gli student* che si iscriveranno al II anno di corso della LM-54 nel A.A. 2024-25.**

MATRICOLA: _____
Cognome _____ Nome _____ Nato/a a: _____
(prov. _____) il _____
Tel. _____ cell. _____ e-mail _____

Student* del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM-54)
Anno di corso: _____

Tabella A. Insegnamenti affini/integrativi 2° anno di corso (TAF C) da 5 CFU - LM-54

Scelta*	INSEGNAMENTO	Docent*	SEM.
<input type="checkbox"/>	ADVANCED NANOMATERIALS CHARACTERIZATION	CIOFFI	2°
<input type="checkbox"/>	BASI MOLECOLARI PER LA PROGETTAZIONE DEI FARMACI	PISANI	2°
<input type="checkbox"/>	CHIMICA ANALITICA AMBIENTALE	MANGONE	2°
<input type="checkbox"/>	CHIMICA COMPUTAZIONALE	CIRIACO	1°
<input type="checkbox"/>	CHIMICA DEGLI ALIMENTI	LONGOBARDI	1°
<input type="checkbox"/>	CHIMICA DEI MATERIALI ORGANICI: DESIGN MOLECOLARE, SINTESI E PROCESSI SOSTENIBILI	BLASI	2°
<input type="checkbox"/>	METODOLOGIE INORGANICHE PER UNA CHIMICA SOSTENIBILE	DIBENEDETTO	2°
<input type="checkbox"/>	MODIFICAZIONI VIA PLASMA DI MATERIALI	FAVIA	1°
<input type="checkbox"/>	PROPRIETÀ CHIMICO FISICHE DEI MATERIALI NANOSTRUTTURATI	CURRI	1°
<input type="checkbox"/>	PROTEOMICA	CATALDI	1°
<input type="checkbox"/>	SPETTROSCOPIA NMR AVANZATA	COLAFEMMINA	2°
<input type="checkbox"/>	TECNICHE LASER NELLE SCIENZE CHIMICHE	DEGIACOMO/ GAUDIUSO	2°

* Barrare la casella relativa ai 2 insegnamenti scelti.

Bari,

Per approvazione

Firma

prof.* _____

TECNICHE DI CARATTERIZZAZIONE AVANZATA DEI NANOMATERIALI (ADVANCED NANOMATERIALS CHARACTERIZATION)

Prof. Nicola Cioffi (5 CFU)

Si mira a fornire allo Studente le nozioni avanzate ed i criteri di scelta relativi alle principali tecniche di investigazione spettroscopica, morfologica o comunque strumentale di superfici nanostrutturate e nanomateriali. Lo Studente deve maturare competenze sia sui principi fondamentali che sugli aspetti strumentali e le applicazioni di svariate modalità di caratterizzazione strumentale di superfici e nanomateriali. Al termine del corso ci si attende che lo Studente abbia sviluppato la capacità di scegliere le tecniche di caratterizzazione più adatte alla risoluzione dei propri specifici problemi analitici.

Programma dettagliato:

1. Definizione e teorie descrittive di superfici ed interfasi.
2. Misurazione del vuoto, tempo di monostato, caratteristiche della contaminazione delle superfici e metodi di pulizia ed ultra-pulizia delle stesse.
3. Caratterizzazione morfologica di nanostrutture e di superfici attraverso scanning probe microscopies che implementino l'elettrochimica (realizzazione, proprietà ed utilizzo di nanoelettrodi come probe, Scanning Electrochemical Microscopy, Electrochemical AFM, Electrochemical STM, ecc).
4. Caratterizzazione di nanomateriali e superfici attraverso scanning electron microscopy e tecniche spettroscopiche accoppiate.
5. Rutherford Backscattering Spectrometry.
6. Spettroscopie fotoelettroniche avanzate per l'analisi di superfici: Near Ambient Pressure-X ray Photoelectron Spectroscopy (NAP-XPS), Parallel Angle Resolved XPS, mapping mode XPS, depth profiling distruttivo, analisi di liquidi e di campioni biologici, effetti dimensionali nell'analisi XPS ed Auger di nanomateriali.
7. Spettrometrie di massa per la caratterizzazione di nanomateriali: Matrix Assisted Laser Desorption Ionization-Mass Spectrometry (MALDI-MS), MALDI-MS Imaging, Desorption Ionization On Silicon-MS (DIOS-MS), Nanoparticle-assisted LDI-MS (NALDI-MS), Time-of-Flight Secondary Ion Mass Spectrometry (TOF-SIMS), ecc.
8. Spettroscopie molecolari per l'analisi di film sottili, biomolecole e biofilm in condizioni operando, in situ, oppure che implementino nanofasi (ATR-IR, SERS, SEIRAS, SPR, ecc).
9. Tecniche di separazione ed analisi di nanocolloidi: Field Flow Fractionation (FFF), Flow-FFF, Gravitational-FFF, Sedimentation-FFF, Hollow-Fiber-FFF, Elettroforesi. Applicazioni specifiche nel campo dei nanomateriali.

Sono previste tre prove in itinere (in forma scritta con quesiti a risposta sia chiusa che aperta) in sostituzione della prova orale per chi frequenta regolarmente.

BASI MOLECOLARI PER LA PROGETTAZIONE DEI FARMACI

Prof. Leonardo Pisani (5 CFU)

1. Drug discovery.

Definizioni ed obiettivi. Processo di drug discovery. Strategie di hit/lead discovery. Bersagli dei farmaci: enzimi, recettori e trasduzione del segnale, acidi nucleici. Fasi dell'azione di un farmaco.

2. Interazioni farmaco-bersaglio.

Fondamenti di farmacodinamica. Interazioni deboli, hydrogen bonding, halogen bonding. Interazioni (pseudo)covalenti.

3. Proprietà molecolari dei farmaci.

Fondamenti di farmacocinetica. Proprietà chimico-fisiche dei farmaci. Metabolismo dei farmaci. Strategie di modulazione delle trasformazioni metaboliche. Esempi di bioattivazione metabolica dei farmaci. Peptidomimetici. Progettazione dei pro-drugs.

4. Meccanismi molecolari di azione dei farmaci (principi e case studies).

Inibitori enzimatici: analoghi dello stato di transizione, substrati suicidi, inibitori covalenti, inibitori con meccanismo radicalico. Agonisti ed antagonisti recettoriali. Farmaci attivi sugli acidi nucleici: agenti intercalanti e alchilanti, chain-terminator, oligonucleotidi antisense.

5. Progettazione razionale di un farmaco.

Modificazioni di un composto hit: omologazione, (bio)isosteria, semplificazione, analoghi rigidi. Relazioni struttura-attività (SAR). Metodi ligand-based: proprietà molecolari, analisi conformazionale, derivazione del farmacoforo, procedure di docking, QSAR, 3D-QSAR. Approcci target-based: structure-based, fragment-based, NMR-based drug design). Case studies.

CHIMICA ANALITICA AMBIENTALE
Prof.ssa Annarosa Mangone (5 CFU)

La chimica della stratosfera:
La chimica dell'inquinamento dell'aria a livello del suolo
ENERGIA E CAMBIAMENTO CLIMATICO
L'effetto serra e il riscaldamento planetario:
Biocombustibili e altri combustibili alternativi
L'energia rinnovabile
CHIMICA E INQUINAMENTO DELL'ACQUA
La chimica delle acque naturali:
Metalli pesanti tossici: Hg, Pb, Cd, Cr, As.
COMPOSTI ORGANICI TOSSICI
Pesticidi, DDT. insetticidi organofosforici e carbammati, insetticidi naturali e verdi. Erbicidi
Diossine, furani e PCB: fonti, esposizione e tossicità
Idrocarburi policiclici aromatici (IPA):
AMBIENTE E STATO SOLIDO
Rifiuti, suoli e sedimenti:
Suolo: chimica di base del suolo, acidità e capacità di scambio cationico del suolo, salinità del suolo.
Sedimenti. Legame dei metalli pesanti al suolo e ai sedimenti. Bonifica del suolo contaminato, analisi e bonifica dei sedimenti contaminati, biorisanamento dei rifiuti e del suolo
Rifiuti urbani e rifiuti pericolosi
Norme comunitarie e italiane in tema di inquinamento e tutela delle risorse ambientali

CHIMICA COMPUTAZIONALE
Prof. Fulvio Ciriaco (5 CFU)

L'operatore hamiltoniano per le molecole
Fattorizzazione del moto nucleare nell'approssimazione Born-Oppenheimer
Requisiti di simmetria delle funzioni d'onda fermioniche. Approcci alla antisimmetrizzazione della funzione d'onda
Densità elettronica e matrici densità
Osservazioni sulla natura degli operatori energia cinetica ed interazione elettrostatica
Soluzione del problema: principali implementazioni
Soluzione delle equazioni Hartree-Fock nelle molecole. Vincoli di simmetria.
Correlazione.
Interazione di configurazione.
Tecniche coupled-cluster: accenni
Introduzione al funzionale densità
Basi nucleo-centriche: GTO e STO. Potenziali di core.
Metodi semiempirici
Modelli per l'interazione della molecola con il solvente
Metodi per il calcolo in fase solida
Configurazione nucleare
Concetto di superficie di energia potenziale nell'approssimazione Born-Oppenheimer
Gradi di libertà, coordinate interne, matrice z ed altre descrizioni della configurazione nucleare.
Determinazione della struttura di minima energia e dello stato di transizione.
Sperimentazione
Introduzione al software di calcolo open-source: GAMESS-US, NWChem, Psi4, GPaw
Descrizione generale del formato di input.
Programmi di visualizzazione ed editing molecolare
Esempi di calcolo HF, DFT e CI di energie di formazione/dissociazione, curve di dissociazione, spettro vibrazionale con correzioni anarmoniche, stati di transizione

CHIMICA DEGLI ALIMENTI

Prof. Francesco Longobardi - Prof.ssa Marilena Muraglia (4+1 CFU)

4 CFU Chimica degli alimenti (Longobardi):

Introduzione al corso

Obiettivi formativi del corso, ricadute sulla professionalità, metodologie didattiche, modalità di verifica dell'apprendimento

Definizione e obiettivi della Chimica degli Alimenti Qualità degli alimenti, Contaminanti degli alimenti, Adulterazione degli alimenti, Compiti della chimica degli alimenti

Macronutrienti

Carboidrati: Classificazione, uso, importanza biologica, presenza negli alimenti, Richiami sulla struttura chimica, sulle caratteristiche chimico fisiche che ne determinano l'attività biologica;

Lipidi: Classificazione, uso, importanza biologica, presenza negli alimenti Richiami sulla struttura chimica, sulle caratteristiche chimico fisiche che ne determinano l'attività biologica;

Proteine: Classificazione, uso, importanza biologica, presenza negli alimenti Richiami sulla struttura chimica, sulle caratteristiche chimico fisiche che ne determinano l'attività biologica

Micronutrienti

Vitamine Liposolubili e Idrosolubili e Sali minerali, Richiami sulla struttura chimica e attività biologica

Metodi di conservazione

Trattamento e conservazione degli alimenti: Conservazione con il freddo, con il calore, per disidratazione, per irradiazione.

Principi base di tecniche analitiche applicate all'analisi di alimenti Metodi di pretrattamento del campione; Metodi cromatografici; Spettroscopia atomica e molecolare; Spettrometria di massa; Spettroscopia di risonanza magnetica nucleare, Metodi isotopici.

Conoscenza di composizione, tecniche di produzione e controlli sui principali alimenti Latte e derivati; Carne, pesce e derivati; Acqua; Vino; Olio di oliva; Cereali; Uova; Frutta e Verdura; Caffè; Miele. Definizione e composizione degli alimenti di interesse e dei principali prodotti derivati; analisi chimico-fisiche degli stessi.

1 CFU Nutraceutica (Muraglia)

Definizione di nutraceutica, alimenti funzionali e integratori.

Sostanze nutraceutiche e ruolo nella prevenzione delle malattie e supporto terapeutico per il miglioramento della salute umana.

Olio d'oliva: un esempio di valore nutraceutico dei polifenoli.

CHIMICA DEI MATERIALI ORGANICI: DESIGN MOLECOLARE, SINTESI E PROCESSI SOSTENIBILI

Prof. Davide Blasi (5 CFU)

Il corso affronta i fondamenti dei semiconduttori organici, inclusi i livelli HOMO/LUMO, i modelli di trasporto di carica (polarone, bipolarone e solitone), la teoria delle bande. Verranno affrontate le tecniche di processing dei materiali organici per l'elettronica e l'optoelettronica molecolare, e si studieranno i principi di funzionamento degli OFET, OLED e del fotovoltaico organico. Verranno inoltre approfondite le metodologie sintetiche per i polimeri policongiugati, concentrandosi sulle reazioni di accoppiamento e sulla retrosintesi.

METODOLOGIE INORGANICHE PER UNA CHIMICA SOSTENIBILE

Prof.ssa Angela Dibenedetto (5 CFU)

Definizione del concetto di sostenibilità

Chimica e sostenibilità

Nuove tecnologie per processi chimici ecocompatibili

Microonde e campi di applicazione, Ultrasuoni, ...

Tecnologie per il controllo dell'inquinamento (atmosfera, acqua, suolo...)

Solventi alternativi
Dai polimeri sintetici alle plastiche biodegradabili
Risorse rinnovabili
Il ruolo della energia solare
Riduzione delle emissioni e dei rifiuti nell'industria chimica e nella produzione di energia
Smaltimento e riciclo

MODIFICAZIONI VIA PLASMA DI MATERIALI **Prof. Pietro Favia (5 CFU)**

Il corso prevede la descrizione di processi plasmochimici usati per modificare le proprietà superficiali dei materiali in svariate applicazioni.

ARGOMENTI: Cenni di tecniche di analisi delle superfici; definizione di plasma; plasmi di equilibrio e plasmi di non equilibrio; reattori plasmochimici; processi plasmochimici di etching, deposizione di film sottili e di grafting di gruppi funzionali; applicazioni dei plasmi di non equilibrio nella scienza e tecnologia dei materiali.

PROPRIETÀ CHIMICO FISICHE DEI MATERIALI NANOSTRUTTURATI **Prof.ssa Maria Lucia Curri (5 CFU)**

Contenuti - Introduzione. Nanotecnologie, nanoscienze, nanochimica, nanomateriali, nanoparticelle e nanocristalli: terminologia e definizioni

- Approcci sintetici e loro rilevanza per la progettazione di nanomateriali con proprietà chimico-fisiche dipendenti dalle dimensioni definite

- Studio, determinazione e interpretazione delle proprietà originali di nanoparticelle inorganiche e nanocristalli. Relazione struttura-funzione relativa alle proprietà optoelettroniche di materiali nanostrutturati

- Ruolo della chimica delle superfici, delle interfacce e delle superfici nei nanomateriali, strategie di ingegneria delle superfici e strumenti di indagine chimico-fisica per lo studio delle loro caratteristiche attraverso diverse scale dimensionali

- (Auto)assemblaggi di nanoparticelle e nanocristalli: meccanismi di (auto)organizzazione, dalla scala molecolare alla nanoscala, fino alla mesoscala: strategie sperimentali e studio delle proprietà chimico-fisiche dei materiali nanostrutturati risultanti

- Nanocompositi a base polimerica contenenti nanoparticelle e nanocristalli: fabbricazione e studio delle proprietà originali derivanti dalla combinazione dei vari componenti del composito

- Integrazione dei nanomateriali in sistemi e dispositivi per applicazioni tecnologiche, comprese le scienze della vita, la conversione dell'energia e l'ambiente.

- Nanomateriali e società: impatto sociale ed economico, sicurezza, ambiente e salute, considerazioni etiche.

PROTEOMICA **Prof. Tommaso Cataldi (5 CFU)**

Introduzione alla proteomica: Le scienze Omiche. Descrizione di un approccio globale per studiare le macromolecole biologiche in vivo; definizione di concetti quali proteomica strutturale, differenziale e funzionale.

Tecniche Elettroforetiche: elettroforesi mono e bidimensionale, applicazioni di proteomica differenziale, mappe bidimensionali, cenni relativi all'analisi di immagine.

Tecniche cromatografiche: descrizione dei principi della cromatografia in sistemi accoppiati LC-MS normali e multidimensionali (MudPIT).

Concetti di spettrometria di massa: struttura generale di uno spettrometro di massa, concetti di accuratezza, sensibilità e risoluzione. Le sorgenti: descrizione delle sorgenti MALDI ed ESI e delle loro applicazioni in ambito proteomico. Gli analizzatori: descrizione dei principi degli analizzatori ToF, quadrupolo, trappola ionica, gli ibridi e delle applicazioni in ambito proteomico. Interpretazione di spettri ESI e MALDI per la caratterizzazione di proteine e miscele di peptidi.

Identificazione delle proteine: l'approccio PMF e descrizione dei principali software impiegati.

La spettrometria di massa tandem nell'analisi di peptidi. Cenni in merito agli esperimenti di Product Ion Scan, SRM, MRM, Neutral Loss, Parent Ion Scan.

La proteomica differenziale: principali approcci di proteomica quantitativa (DIGE, ICAT, SILAC, iTRAQ, O18, AQUA). Lo studio delle modifiche post-traduzionali: la fosfoproteomica.

Testi consigliati:

1. Introduction to proteomics, Principles and Applications (2010) N. Mishra, John Wiley & Sons, Inc., Publication.
2. Introduction to Proteomics, Tools for the New Biology (2002) D.C. Liebler, ed. Humana press.
3. Principles of Proteomics (2004), R.M. Twyman, ed. Advanced Text

SPETTROSCOPIA NMR AVANZATA **Prof. Giuseppe Colafemmina (5 CFU)**

Momenti angolari e magnetici di spin. Livelli energetici. Frequenza angolare di Larmor Modello vettoriale e magnetizzazione macroscopica. Effetto di un impulso a radiofrequenza. Descrizione della magnetizzazione in sistema di riferimento rotante. Segnale NMR. Effetto sulla magnetizzazione dei diversi angoli di impulsi e impulsi on-resonance ed off-resonance e fase del segnale.

Strumentazione NMR – Descrizione dei diversi componenti: magnete, sintetizzatore, pulse programmer, probe, preamp, amplificatore, ADC detection in quadratura, componente reale ed immaginario, composizione del segnale ed effetti degli shift di fase degli impulsi o del ricevitore. Fast Fourier Transform.

Descrizione quantomeccanica di un insieme di spin. Popolazione e magnetizzazione. Descrizione matriciale e matrice densità ed evoluzione temporale. Effetto di un impulso. Regole geometriche per l'evoluzione sotto impulso e sotto precessione libera. Dagli operatori al segnale. Descrizione di impulso e acquisizione e della sequenza di spin-echo. Sistemi debolmente accoppiati e costante di accoppiamento. Introduzione degli operatori prodotto. Regole di evoluzione sotto accoppiamento. Spin-echo per sistemi accoppiati e J-modulation. Transfer di polarizzazione e transizioni doppio-quantiche. Spin-echo per sistemi eteronucleari di tipo InS. Accoppiamento forte: sistemi AB paragonati a sistemi AX. Sequenze INEPT, DEPT e APT. Fourier Transform in 2D. Segnale coseno modulato e seno modulato. Riconoscimento delle frequenze: Metodo Stats e metodo TPPI. Spettroscopia di correlazione: COSY, picchi diagonali e cross peak. DQF-COSY e TOCSY. Spettroscopia di correlazione eteronucleare: HSQC e HMQC. Correlazioni long range: HMBC. Correlazioni spaziali: NOESY.

Moti molecolari e meccanismi di rilassamento. Tempo di correlazione. Funzione di correlazione e densità spettrale. Popolazione, magnetizzazione e rilassamento longitudinale Misura del T1. Rilassamento in sistemi accoppiati. NOE e sua misura: NOE transiente e NOE stazionario. Rilassamento trasversale e misura del T2.

Esercizi numerici sui diversi argomenti del corso da svolgere a casa e in aula.

TECNICHE LASER NELLE SCIENZE CHIMICHE (CON LABORATORIO) **Prof.ssa Rosalba Gaudiuso - Prof. Alessandro De Giacomo (5 CFU)**

Il corso si propone di fornire agli studenti i concetti di base, una panoramica di tecniche sperimentali e un'ampia casistica di risultati e teorie di interesse nel campo delle applicazioni dei laser alle principali suddivisioni della chimica, ovvero struttura e proprietà della materia; sintesi e reattività; analisi.

Il modulo di didattica frontale conterà dei seguenti argomenti:

- Principi di funzionamento e proprietà dei laser.
- Tipologie e classi di sorgenti laser, sicurezza in laboratorio laser.
- Fondamenti ed applicazioni di spettroscopie laser per lo studio di sistemi atomici e molecolari. Per ciascuna delle tecniche presentate saranno discussi dei casi di studio selezionati per mostrarne le potenzialità pratiche.
 - Tecniche di laser scattering: Raman, Coherent Anti-Stokes Raman Spectroscopy (CARS), Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS).
 - Fluorescenza indotta da laser (Laser-Induced Fluorescence, LIF); assorbimento; fotoacustica.
 - Ablazione laser per l'analisi chimica: Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS); Laser Ablation – Inductively Coupled Plasma – Mass Spectrometry (LA-ICP-MS).
- Reazioni chimiche indotte da laser: principi fondamentali e applicazioni industriali e di ricerca.
 - Principi, specificità ed esempi di fotochimica laser.
 - Sintesi di materiali tramite tecniche di ablazione laser: film sottili, nanomateriali, grafene.
 - Applicazioni avanzate in campo industriale e biomedico (es. Metodi di additive manufacturing; terapia fotodinamica e teranostica).

Esempi di esperienze che saranno realizzate nel modulo di laboratorio includono:

- Caratterizzazione e calibrazione di sorgenti laser e sistemi spettrometrici.
- Analisi di meteoriti tramite LIBS.
- Produzione e caratterizzazione di nanoparticelle in acqua tramite ablazione laser in fase liquida.
- LIF di clorofilla in estratti di foglie verdi e olio d'oliva.
- Effetti plasmonici indotti da nanoparticelle: Nanoparticle-Enhanced LIBS (NELIBS).