

Corsi del Dottorato di Scienze Chimiche e relativi Docenti

I SEMESTRE (1 DICEMBRE 2018-28 FEBBRAIO 2019)

- 1) **La Spettroscopia Raman nella caratterizzazione dei materiali: principi ed applicazioni**
3 CFU ,24 ore
Delia Gazzoli
 - 2) **Metabolomica**
3 CFU ,24 ore
Giorgia la Barbera
-

II SEMESTRE (1 APRILE-30 GIUGNO 2019)

- 3) **Applicazione dei Metodi Computazionali in Chimica (spettroscopia molecolare)**
6 CFU, 48 ore
Lorenzo Gontrani
- 4) **Metodi computazionali per la modellizzazione di sistemi molecolari complessi**
3 CFU ,24 ore
Marco D'Abramo
- 5) **Nanotecnologie e nanomateriali per applicazioni industriali**
6 CFU , 48 ore
Cleofe Palocci
- 6) **Chemiometria applicata con elementi di MATLAB**
6 CFU ,48 ore
Federico Marini
- 7) **Sintesi organiche Ecocompatibili**
6 CFU ,48 ore
Andrea D'Annibale

Orario I semestre

<i>Professore</i>	<i>Lunedì</i>	<i>Martedì</i>	<i>Mercoledì</i>	<i>Giovedì</i>	<i>Venerdì</i>	<i>INIZIO</i>	<i>CFU</i>
La Barbera	11-13		11-13			15/1/2018	3
Gazzoli	13-15		12-14			15/1/2018	3

Orario II semestre

<i>Professore</i>	<i>Lunedì</i>	<i>Martedì</i>	<i>Mercoledì</i>	<i>Giovedì</i>	<i>Venerdì</i>	<i>INIZIO</i>	<i>CFU</i>
D'Abramo	11-13		14-16			1/4/2019	3
Gontrani	9-11		9-11		11-13	1/4/2019	6
Palocci		9-11		9-11	9-11	1/4/2019	6
Marini		14-16	16-18	14-16		1/4/2019	6
D'Annibale	14-16		11-13		14-16	1/4/2019	6

**I CORSI SONO TENUTI TUTTI IN AULA F
PIANO TERRA VECCHIO EDIFICIO DI CHIMICA**

Prof. Osvaldo Lanzalunga
Coordinatore del Dottorato in Scienze Chimiche
Mail: osvaldo.lanzalunga@uniroma1.it

Programmi dei Corsi Istituzionali del Dottorato in Scienze Chimiche

I SEMESTRE 2018

1) La Spettroscopia Raman nella caratterizzazione dei materiali: principi ed applicazioni

Prof. Delia Gazzoli

3 CFU

Obiettivi

Il corso, articolato in lezioni teoriche ed esercitazioni di laboratorio, è focalizzato sull'acquisizione dei principi fondamentali dello scattering Raman allo scopo di comprenderne la potenzialità e l'applicabilità allo studio di varie tipologie di materiali (organici ed inorganici).

Programma

Interazione radiazione elettromagnetica-materia. Introduzione allo scattering della luce: scattering Rayleigh (quasi elastico) e Raman (anelastico).

Trattazione classica dell'effetto Raman. Cenni al trattamento quantistico: operatore polarizzabilità e concetto di livello virtuale. Regole di selezione di simmetria, cenni di teoria dei gruppi.

Confronto con la spettroscopia IR.

Scattering Raman risonante, SERS (surface-enhanced Raman scattering) e cenni a tecniche avanzate basate sullo scattering Raman.

Apparati sperimentali per spettroscopia Raman: strumentazione e configurazione per la raccolta dei dati. Interpretazione degli spettri: aspetti teorici e pratici.

Illustrazione di studi relativi a materiali inorganici ed organici, di interesse per i beni culturali, per applicazioni biologiche e medico-farmacologiche.

Esperienze di laboratorio: acquisizione ed interpretazione di spettri Raman di vari materiali.

2) Metabolomics

3 CFU

Dott. Giorgia La Barbera

1. La metabolomica e le sue applicazioni in campo clinico, alimentare, ambientale, forense.
2. Tipici approcci nel campo della metabolomica: fingerprinting, targeted, profiling, untargeted e relative tecniche analitiche (NMR vs MS)
3. Approccio fingerprinting e relativi esempi
4. Approccio targeted e relativi esempi
5. Approccio profiling e relativi esempi
6. Approccio untargeted e relativi esempi
7. Study design e raccolta del campione in metabolomica untargeted
8. Preparazione del campione in metabolomica per NMR
9. Preparazione del campione in metabolomica per MS
10. Analisi del campione in metabolomica untargeted con NMR
11. Analisi del campione in metabolomica untargeted con MS

12. Analisi dei dati in metabolomica untargeted: analisi statistica multivariata
13. Identificazione di biomarcatori con NMR: interpretazione degli spettri e conferma della struttura
14. Identificazione di biomarcatori con MS: interpretazione degli spettri e match con database
15. Identificazione di biomarcatori con MS: sintesi composto e conferma della struttura
16. Validazione dei biomarcatori
17. Applicazioni in campo clinico: identificazione di biomarcatori di patologie, studio dell'effetto di farmaci, studio di specifici meccanismi metabolici.
18. Applicazioni in campo alimentare: identificazione di nuovi composti bioattivi, tracciabilità alimentare, origine geografica, controllo qualità e sicurezza alimentare.
19. Applicazioni in campo ambientale: identificazione di nuovi contaminanti, identificazione di prodotti di degradazione di contaminanti.
20. Applicazioni in campo forense: identificazione di nuove droghe, identificazione di nuove sostanze dopanti.
21. Flussomica
22. Lezioni successive:
23. Approfondimenti degli argomenti trattati su richiesta degli studenti.

=====

II SEMESTRE 2019

3) Metodologie di base della Chimica Computazionale (6 CFU)

Prof. Lorenzo Gontrani

Il corso, rivolto agli studenti di dottorato di ricerca in chimica di qualsiasi indirizzo, introduce lo studente alle metodologie di base della chimica computazionale e alla loro applicazione nello studio delle proprietà dei sistemi molecolari. Parallelamente all'apprendimento o approfondimento di alcuni aspetti corso

L'obiettivo principale è l'acquisizione della capacità di utilizzo critico e consapevole dei metodi computazionali oggi disponibili nei programmi di calcolo. Il corso è strutturato in due moduli principali:

- 1) metodi basati sulla chimica quantistica
- 2) metodi basati sulla dinamica molecolare classica

Nel primo modulo, lo studente potrà apprendere le metodologie per:

ottenere la struttura molecolare del sistema (ottimizzazione di geometria)

prevedere le proprietà ottiche - spettri rotazionali, vibrazionali (IR, Raman), UV-Vis e le proprietà magnetiche (VCD e chemical shift NMR)

calcolare i parametri termochimici dei sistemi molecolari (equilibri conformazionali) e studiare

semplici meccanismi di reazione.

calcolare il potenziale elettrostatico e studiare le interazioni deboli (ad esempio, legame idrogeno / alogeno)

Nel corso del secondo modulo, lo studente potrà apprendere i fondamenti della dinamica molecolare basata su campi di forze classici ed effettuare simulazioni di proprietà strutturali e dinamiche di sistemi complessi, con particolare attenzione a liquidi (molecolari e ionici) e soluzioni. Ampio spazio verrà dato alla parametrizzazione dei campi di forze per sistemi “non standard”, con eventuale calcolo dei parametri mediante calcoli ab initio, ed al calcolo di grandezze fisiche dei liquidi, quali ad esempio fattore di struttura, coefficiente di auto-diffusione, entalpia di vaporizzazione.

Programma dettagliato del Corso

Introduzione ai metodi di struttura elettronica molecolare

Approssimazione Adiabatica e di Born-Oppenheimer

Calcolo dell'Energia Elettronica, valor medio dell'energia e valor “esatto”. Principio Variazionale.

Metodo Hartree-Fock e le equazioni di Hartree-Fock. Metodo variazionale

Approssimazione del Basis Set - espansione degli Orbitali Molecolari su funzioni di base

Ottimizzazione di geometria molecolare: caratterizzazione della superficie di energia potenziale (PES), punti di minimo e di sella, gradiente ed Hessiano. Ricerca delle strutture degli stati di transizione

Metodi di Correlazione Elettronica: interazione di Configurazione (CI) e Metodi Perturbativi MBPT. Energia di Møller-Plesset (MP2, MP3 e MP4)

Proprietà molecolari

Frequenze vibrazionali armoniche e intensità spettrale IR e Raman. Assegnazione degli spettri vibrazionali di molecole poliatomiche mediante l'analisi P.E.D. Spettri elettronici (UV-VIS e dicroismo circolare)

Proprietà dipendenti dal momento magnetico: NMR shielding, VCD, ROA (cenni)

Modelli di solvatazione in chimica quantistica

Il metodo PCM (Polarisable Continuum Model) per lo studio dell'effetto del solvente sulle proprietà molecolari (cenni)

Campi di forza classici per meccanica/dinamica molecolare

Termini di stretching, bending, torsionali, non legame ed elettrostatici. Termini aggiuntivi (diedri

impropri, out of plane, legame idrogeno, vincoli su dati sperimentali (NOE)

Generazione di ensemble configurazionali della meccanica statistica

Metodi Montecarlo (cenni) e Dinamica Molecolare. Calcolo di proprietà dalle traiettorie

Testi di riferimento / Reference Texts

F. Jensen "Introduction to Computational Chemistry", Wiley, 1996

J. B. Foresman, A. Frisch "Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods", Gaussian Inc, 1996

4) Metodi computazionali per la modellizzazione di sistemi molecolari complessi

Marco D'Abramo / Domenico Raimondo

3 CFU

Programma

1. Introduzione alle tecniche computazionali.

Principi di base della dinamica molecolare classica, limiti, scopi ed attendibilità.

Introduzione all'uso di software applicativi per la costruzione e visualizzazione di sistemi molecolari.

Cenni di metodi misti QM/MM: trattamento esplicito degli elettroni.

2. Nozioni di base di bioinformatica

Banche dati di sequenze nucleotidiche e di sequenze proteiche

Banche dati di motivi e domini proteici. Banche dati di strutture proteiche.

Indirizzi web per banche dati e risorse biologiche

3. Allineamento di sequenze di acidi nucleici e proteine

Introduzione al problema degli allineamenti di sequenze. Similarità di sequenze e algoritmi di allineamento. Allineamenti di sequenze biologiche: Le matrici di sostituzione (Le matrici PAM, Le matrici BLOSUM). Metodi di allineamento esatto: allineamenti globali e locali, algoritmi dinamici di allineamento, l'algoritmo di Smith e Waterman per la ricerca di similarità locali. Metodi euristici di allineamento.

Ricerca di similarità in banche dati: FASTA, BLAST. Generazione e applicazione dei profili dei multiallineamenti.

4. Modellizzazione di sistemi complessi: dalla struttura alla dinamica.

Come si costruisce un sistema complesso: da liquidi puri a complessi macromolecolari in soluzione.

Metodi di rappresentazione delle strutture proteiche. Programmi di grafica molecolare

Metodi per la predizione della struttura terziaria. Homology modelling.

Metodi avanzati di campionamento e di analisi delle traiettorie.

Metodi avanzati di calcolo: introduzione all'High Performance Computing.

5. Esempi pratici ed applicazioni:

- Liquidi e soluzioni: calcolo di proprietà termodinamiche e dinamico-strutturali
- Peptidi: proprietà dinamiche e strutturali
- Proteine e DNA: struttura e cambiamenti conformazionali

Obiettivi

Il corso si propone di far acquisire agli studenti le competenze e gli strumenti necessari per effettuare una modellizzazione di sistemi complessi che possa essere complementare alla propria attività di ricerca.

5) Nanotecnologie e nanomateriali per applicazioni industriali

6 CFU

Prof. Cleofe Palocci

Obiettivi formativi

Come è noto lo sviluppo di nuovi materiali si affianca da sempre all'evoluzione tecnologica della nostra società: le aziende più competitive investono ingenti risorse umane ed economiche nell'innovazione dei materiali e dei processi produttivi per trovare nuove soluzioni progettuali e far fronte alle sempre più stringenti esigenze del mercato. Ad oggi, ad esempio, è diventato sempre più importante formare ricercatori dotati di competenze specialistiche in settori di punta quali quello delle nanoscienze e nanotecnologie, al fine di fornire conoscenze "trasversali" necessarie a interagire operativamente in diversi campi disciplinari.

Il corso è articolato nei seguenti contenuti:

- Approccio "bottom up e top down" nella preparazione di nanomateriali
 - Proprietà dei materiali nanometrici ("size effect")
 - Principali metodi di nanofabbricazione
 - I microreattori fluidici per la sintesi di nanoparticelle (lab on chip)
 - Principali tecniche di caratterizzazione dei materiali nanostrutturati
 - Applicazioni dei nanomateriali in diversi settori industriali ed in particolare nel settore biotecnologico
-

6) CHEMIOMETRIA APPLICATA con elementi di MATLAB

6 CFU

Prof. Federico Marini

PROGRAMMA

- 1. Richiami di algebra matriciale e introduzione all'ambiente MATLAB.** Scalari, vettori, matrici, prodotti vettoriali e matriciali e loro rappresentazione in ambiente matlab. Tipologie di variabili MATLAB e funzioni algebriche elementari.
- 2. Calibrazione univariata e multivariata.** Il metodo dei minimi quadrati. Regressione lineare univariata. Calcolo delle bande di confidenza e degli errori di previsione. Generalizzazione al caso multivariato: la regressione lineare multipla. Esercitazioni in MATLAB.
- 3. Disegno sperimentale.** Disegni simultanei e sequenziali. Disegni fattoriali a due livelli (completi e frazionati). Calcolo degli effetti e della loro significatività. Disegni di screening. Superfici di risposta. Esercitazioni in MATLAB.
- 4. Analisi Esplorativa.** Introduzione all'analisi multivariata. L'analisi delle componenti principali. Criteri per la scelta delle PC. Identificazione degli outliers. Esercitazioni in MATLAB.
- 5. Regressione sulle variabili latenti.** La regressione sulle componenti principali. L'algoritmo PLS. Selezione delle variabili ed interpretazione del modello. Esercitazioni in MATLAB.

6. **Classificazione.** Problemi di classificazione in chimica. Classificazione discriminante e modellante. L'analisi discriminante lineare e quadratica. Il metodo PLS-DA. SIMCA e la classificazione modellante. Coomans plot. Esercitazioni in MATLAB.
7. **Curve resolution.** Multivariate curve resolution (MCR) e le sue applicazioni chimiche. Scelta dei constraints. Estensione al caso di più matrici di dati: l'analisi multiset. Applicazioni all'analisi di immagini. Esercitazioni in MATLAB.
8. **Metodi multiway.** Segnali chimici multidimensionali e loro rappresentazione attraverso arrays di dati. Introduzione all'analisi multi-way. Il metodo PARAFAC. Esercitazioni in MATLAB.

7) Sintesi Organiche Ecocompatibili

.....

....

6 CFU

Dott. Andrea D'Annibale

PROGRAMMA

Green chemistry: i dodici principi della green chemistry. Aspetti innovativi della green chemistry.

Procedure "green" per la sintesi di molecole organiche in assenza di solventi inquinanti e reagenti tossici.

Reazioni solvent-free. Reazioni promosse in condizioni solvent-free da superfici (SiO₂, Al₂O₃, zeoliti). Casi di letteratura di sintesi solvent-free accademiche ed industriali.

Reazioni organiche in mezzo acquoso. Effetti del mezzo acquoso sulla polarità: effetti di polarità, effetto idrofobico, legami idrogeno, sistemi eterogenei. Esempi di reazioni in acqua. Reazioni mediate da metalli di transizione, ossidazioni e riduzioni, addizioni e sostituzioni elettrofile, sostituzioni nucleofile. Esempi di sintesi industriali in fase acquosa.

Reazioni organiche in mezzi non acquosi a basso impatto ambientale. Definizione dell'impatto ambientale di un solvente. CO₂ in fase supercritica. Solventi fluorurati. Liquidi Ionici.

Sintesi chimiche in fase solida. Reazioni basate su mescolamento meccanochimico in mulino a sfere.

Reagenti organici a basso impatto ambientale: Organocatalisi e organocatalizzatori. Catalizzatori metallici. Enzimi e Biocatalisi. Esempi di trasformazioni industriali basate su tali reagenti.

Sintesi organica attraverso procedure a basso impatto ambientale: mescolamento meccanochimico in mulino a sfere, sintesi chimiche in fase solida. Reazioni assistite da riscaldamento a microonde.

Utilizzo della chimica organica "green" in processi industriali.