

Verbale del Consiglio unico del CdS in Chimica e in Scienze Chimiche 16/03/2022

Il Consiglio unico del CdS in Chimica e in Scienze Chimiche si riunisce il giorno 16/03/2022 alle ore 12.30 in modalità telematica con il seguente ordine del giorno:

1. Comunicazioni
2. Approvazione verbale del 14/01/2022
3. Sessione straordinaria esami di laurea A.A. 2020/2021
4. Calendario esami di laurea A.A. 2021/2022
5. Variazione della programmazione didattica della Laurea in Chimica (L27) A.A. 2021/2022
6. Variazione della programmazione didattica della Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM54) A.A. 2021/2022
7. Variazione della programmazione didattica della Laurea in Chimica (L27) A.A. 2022/2023
8. Variazione della programmazione didattica della Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM54) A.A. 2022/2023
9. Scheda SUA quadro A4.D – Corso di Laurea Triennale in Chimica (L27)
10. Scheda SUA quadro A4.D – Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM54)
11. Doppio titolo tra Scienze Chimiche (LM-54) e Master in “Integrative Chemistry and Innovation” Chimie ParisTech PSL
12. Attività didattica integrativa ricercatori A.A. 2022-2023
13. Richieste attività didattica integrativa di dottorandi
14. Varie ed eventuali

Nelle tabelle seguenti sono indicati i partecipanti (P) e gli assenti giustificati (G).

| Professori ordinari | Presente | Giustificato |
|----------------------------|-----------------|---------------------|
| 1. Baglioni Piero | | |
| 2. Banci Lucia | | G |
| 3. Berti Debora | P | |
| 4. Bianchi Antonio | P | |
| 5. Bianchi Gabriele | P | |
| 6. Bruni Paola | | G |
| 7. Cardini Gianni | | G |
| 8. Colesanti Andrea | P | |
| 9. Dei Luigi | P | |
| 10. Fratini Emiliano | P | |
| 11. Goti Andrea | P | |
| 12. Luchinat Claudio | P | |
| 13. Marrazza Giovanna | | G |
| 14. Menichetti Stefano | P | |
| 15. Minunni Maria | P | |
| 16. Nativi Cristina | P | |
| 17. Papini Anna Maria | P | |
| 18. Pierattelli Roberta | | G |
| 19. Sessoli Roberta | | G |
| 20. Valtancoli Barbara | | G |

| Professori Associati | Presente | Giustificato |
|-------------------------------|-----------------|---------------------|
| 21. Andreini Claudia | | G |
| 22. Bazzicalupi Carla | P | |
| 23. Bello Claudia | P | |
| 24. Bencini Andrea | P | |
| 25. Bianchini Chiara | | G |
| 26. Bini Roberto | | |
| 27. Bonini Massimo | P | |
| 28. Cacciarini Martina | | G |
| 29. Cantini Francesca | | |
| 30. Cardona Francesca | P | |
| 31. Carretti Emiliano | P | |
| 32. Cencetti Francesca | | |
| 33. Chelli Riccardo | | |
| 34. Cicchi Stefano | P | |
| 35. Cincinelli Alessandra | P | |
| 36. Ciofi Baffoni Simone | | |
| 37. Cordero Franca Maria | | G |
| 38. Cuccoli Alessandro | P | |
| 39. Del Bubba Massimo | P | |
| 40. Feis Alessandro | P | |
| 41. Felli Isabella Caterina | | |
| 42. Fiaschi Tania | P | |
| 43. Frediani Marco | | G |
| 44. Furlanetto Sandra | P | |
| 45. Giannelli Carlotta | P | |
| 46. Gianni Roberto | P | |
| 47. Giomi Donatella | P | |
| 48. Giorgi Claudia | | G |
| 49. Giuntini Lorenzo | P | |
| 50. Innocenti Massimo | P | |
| 51. Laurati Marco | P | |
| 52. Lelli Moreno | P | |
| 53. Lo Nostro Pierandrea | P | |
| 54. Mannini Matteo | P | |
| 55. Marradi Marco | P | |
| 56. Martellini Tania | P | |
| 57. Messori Luigi | P | |
| 58. Occhiato Ernesto Giovanni | | G |
| 59. Pagliai Marco | P | |
| 60. Palchetti Ilaria | P | |
| 61. Paoli Paolo | | |
| 62. Piccioli Mario | P | |
| 63. Poggiolini Laura | P | |
| 64. Ravera Enrico | P | |
| 65. Ridi Francesca | P | |
| 66. Ristori Sandra | P | |
| 67. Rosato Antonio | P | |
| 68. Rosi Luca | P | |

| | | |
|-------------------------|---|--|
| 69. Salvini Antonella | P | |
| 70. Scarano Simona | P | |
| 71. Severi Mirko | P | |
| 72. Sorace Lorenzo | P | |
| 73. Torre Renato | P | |
| 74. Totti Federico | P | |
| 75. Traversi Rita | P | |
| 76. Viglianisi Caterina | P | |

| Ricercatori | Presente | Giustificato |
|------------------------------|-----------------|---------------------|
| 77. Aloisi Giovanni | P | |
| 78. Caminati Gabriella | | G |
| 79. Fort Chiara | P | |
| 80. Pietraperzia Giangaetano | P | |
| 81. Scarpi Dina | P | |

| Ricercatori a tempo determinato | Presente | Giustificato |
|--|-----------------|---------------------|
| 82. Berti Eugenio | P | |
| 83. Bracco Cesare | P | |
| 84. Chelazzi David | P | |
| 85. Conti Luca | P | |
| 86. Francesconi Oscar | P | |
| 87. Ferraro Giovanni | P | |
| 88. Mastrangelo Rosangela | P | |
| 89. Matassini Camilla | P | |
| 90. Montis Costanza | | G |
| 91. Palladino Pasquale | P | |
| 92. Parravicini Jacopo | P | |
| 93. Perfetti Mauro | P | |
| 94. Poggi Giovanna | P | |
| 95. Rotundo Nella | P | |
| 96. Tanini Damiano | P | |
| 97. Tenori Leonardo | P | |

| Rappresentanti degli studenti | Presente | Giustificato |
|--------------------------------------|-----------------|---------------------|
| 98. Cosci Davide | | |
| 99. Costantino Azzurra | P | |
| 100. Nesti Tommaso | | G |
| 101. Prevedello Chiara | P | |
| 102. Sartini Daniele | | |
| 103. Zamagni Martina | P | |
| 104. Zidaru Roxana Elena | P | |

| Professori a contratto | Presente | Giustificato |
|-------------------------------|-----------------|---------------------|
| 105. Lai Marco | | G |
| 106. Machetti Fabrizio | P | |
| 107. Gurioli Gianmarco | P | |

| | | | |
|------|------------------|---|--|
| 108. | Calusi Benedetta | P | |
|------|------------------|---|--|

La Prof.ssa Carla Bazzicalupi assume le funzioni di segretario verbalizzante.

Alle ore 12:33 constatato il raggiungimento del numero legale, il Presidente dichiara aperta la seduta.

1. Comunicazioni

La Scuola di SMFN ha aperto la seconda finestra di presentazione dei piani di studio secondo le seguenti date:

- finestra di compilazione: lunedì 14 marzo – sabato 9 aprile 2022
- finestra di ricompilazione: domenica 10 aprile – mercoledì 27 aprile 2022.

La dott.ssa Maria Orfeo ha inviato in data 04/03/2022 la nota della Rettrice (prot.n. 49577 del 4 marzo 2022) in merito alla proroga relativa all'anno accademico 2020/2021 al 15 giugno 2022.

Nella nota sono riportate le seguenti indicazioni:

- favorire la più ampia partecipazione nella sessione di esame di profitto programmata nel mese di aprile;
- definire una ulteriore sessione di esame di laurea da calendarizzare nella prima metà di giugno.

Il calendario delle lezioni per l'Anno Accademico 2022/2023 stabilito della Scuola di SMFN (approvato dal Consiglio della Scuola di SMFN in data 18/02/2022) è articolato nei seguenti periodi:

- Primo semestre: 12 settembre 2022 – 23 dicembre 2022.
- Secondo semestre: 20 febbraio 2023 – 16 giugno 2023.

è prevista un'interruzione per esami e prove di verifica intermedie nel periodo pasquale (il giorno di Pasqua è il 9 aprile 2023) dal 3 al 14 aprile 2023 compresi.

2. Approvazione verbale del 14/01/2022

Si mette in approvazione il verbale del 14/01/2022 che è stato inviato per posta elettronica a tutti i componenti del CdS.

Il Presidente pone in approvazione il verbale.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti.

3. Sessione straordinaria esami di laurea A.A. 2020/2021

A seguito della nota della Rettrice (prot.n. 49577 del 4 marzo 2022) in merito alla proroga relativa all'anno accademico 2020/2021 al 15 giugno 2022, la Scuola di SMFN ha richiesto con urgenza una data per la sessione di laurea nel periodo 1 – 15 giugno 2022, cercando di evitare sovrapposizioni con altri CdS.

Con i vari presidenti dei CdS della Scuola di SMFN è stato predisposto un calendario ed è stato stabilito che la sessione di laurea per il CdS in Chimica e Scienze Chimiche sarà il giorno 8 giugno 2022.

Il Presidente pone in approvazione a ratifica.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

4. Sessioni esami di laurea A.A. 2021/2022

Sono proposte le seguenti date per gli esami di laurea per l'A.A. 2021/2022:

- 29/06/2022
- 20/07/2022
- 14/09/2022
- 19/10/2022
- 14/12/2022
- 08/02/2023
- 19/04/2023

Il Presidente pone in approvazione

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti.

5. Variazione della programmazione didattica della Laurea in Chimica (L27) A.A. 2021/2022

Il corso di insegnamento B006855 - Calcolo numerico e programmazione, cognomi L-Z (6 CFU), Laurea Triennale in Chimica (L27), previsto per il secondo semestre e inizialmente affidato al dott. Bracco Cesare (4 CFU) e al dott. Lorenzo Sacco (2 CFU), è stato affidato per 4 CFU al dott. Bracco Cesare e 2 CFU al dott. Gurioli Gianmarco

Il Presidente pone in approvazione a ratifica.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

Il corso di insegnamento B006954 - Matematica II, cognomi L-Z (6 CFU), Laurea Triennale in Chimica (L27), previsto per il secondo semestre e inizialmente affidato alla prof.ssa Chiara Bianchini, è stato affidato per 1 CFU alla prof.ssa Poggiolini Laura e per 5 CFU alla dott.ssa Calusi Benedetta.

Il Presidente pone in approvazione a ratifica.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

6. Variazione della programmazione didattica della Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM54) A.A. 2021/2022

Il corso di insegnamento B012863 – Tecnologia di materiali avanzati (6 CFU), Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM54), previsto per il secondo semestre, inizialmente affidato al Prof. Ugo Bardi (6 CFU), è stato affidato per 1 CFU al Prof. Gianni Cardini, 2 CFU alla prof.ssa Francesca Ridi e 3 CFU alla dott.ssa Giovanna Poggi.

Il Presidente pone in approvazione a ratifica.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

Il corso di insegnamento B012847 – Chimica Fisica delle superfici (6 CFU), Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM54), previsto per il secondo semestre, inizialmente affidato al Prof. Ugo Bardi (6 CFU), è stato affidato per 6 CFU al Prof. Massimo Bonini.

Il Presidente pone in approvazione a ratifica.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

7. Variazione della programmazione didattica della Laurea in Chimica (L27) A.A. 2022/2023

Il corso di insegnamento B006878 - Chimica analitica ambientale con laboratorio, Laurea Triennale in Chimica (L27), previsto per il primo semestre tenuto dalla prof.ssa Marrazza viene mutuato dal corso di insegnamento Chimica analitica applicata con laboratorio, Laurea Triennale in Chimica (L27), previsto per il primo semestre affidato alla prof.ssa Marrazza.

Il Presidente pone in approvazione a ratifica.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

Il corso di insegnamento B006954 - Matematica II, cognomi A-K (6 CFU), Laurea Triennale in Chimica (L27), previsto per il secondo semestre è stato affidato alla dott.ssa Lucardesi Ilaria (6 CFU).

Il Presidente pone in approvazione a ratifica.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

Il corso di insegnamento B031206 – Materiali e metodologie per i beni culturali, Laurea Triennale in Chimica (L27), previsto per il secondo semestre inizialmente affidato per 6 CFU al dott. Chelazzi David, è stato affidato per 5 CFU al dott. Chelazzi David e per 1 CFU al prof. Giorgi Rodorico.

Il Presidente pone in approvazione a ratifica.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

Il corso di insegnamento B031213 – Laboratorio di Fisica, Laurea Triennale in Chimica (L27), previsto per il primo semestre, è stato affidato per 4 CFU alla dott.ssa Fort Chiara, per 1 CFU al dott. Salvi Leonardo e 1 CFU al dott. Lio Giuseppe Emanuele.

Il Presidente pone in approvazione a ratifica.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

8. Variazione della programmazione didattica della Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM54) A.A. 2022/2023

Il corso di insegnamento B020966 – Solidi Molecolari: struttura, dinamica e spettroscopie ottiche e NMR (6 CFU), Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM54), previsto inizialmente per il secondo semestre ed affidato per 3 CFU al prof. Riccardo Chelli e per 3 CFU al prof. Moreno Lelli è stato spostato al primo semestre.

Il Presidente pone in approvazione a ratifica.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

Il corso di insegnamento B016298 – Laboratorio di nanomateriali, Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM54), previsto per il secondo semestre inizialmente affidato per 3 CFU al prof. Emiliano Fratini e 3 CFU per la prof.ssa Francesca Ridi, è stato affidato per 6 CFU alla prof.ssa Ridi.

Il Presidente pone in approvazione a ratifica.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

Si chiede che le ore di didattica per il corso di insegnamento B012711 – Sintesi e reattività dei complessi metallici (6 CFU), Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM54), previsto per il secondo semestre ed affidato per 6 CFU alla prof.ssa Claudia Giorgi siano portate a 48 ore di didattica frontale (6 CFU) da 40 ore di didattica frontale (5 CFU) e 12 ore di laboratorio (1 CFU).

Il Presidente pone in approvazione.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

9. Scheda SUA quadro A4.D – Corso di Laurea Triennale in Chimica (L27)

Il presidente illustra il testo che deve essere riportato nella Scheda SUA, quadro A4.D, relativo alla descrizione sintetica delle attività affini ed integrative in sostituzione ai SSD.

Per il corso di Laurea Triennale in Chimica viene proposto il seguente testo:

“Gli insegnamenti offerti nelle attività affini ed integrative sono mirati a migliorare la preparazione interdisciplinare e ad esaminare tematiche non trattate negli insegnamenti di base e caratterizzanti. Tuttavia, data la molteplicità delle tematiche presenti nei diversi SSD, nelle attività affini ed integrative potranno figurare anche SSD già presenti tra quelle di base e caratterizzanti. Saranno pertanto fornite ulteriori conoscenze di matematica, fisica e chimica.

Questi insegnamenti consentono allo studente di acquisire conoscenze e competenze fondamentali per perfezionare le sue capacità scientifiche e professionali nei corsi di studio di secondo livello o per affrontare il mondo del lavoro nei diversi settori della chimica.”

Si apre una rapidissima discussione su richiesta di chiarimento del prof. Menichetti a cui intervengono il Presidente ed il prof. Cuccoli.

Il Presidente pone in approvazione.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

10. Scheda SUA quadro A4.D – Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM54)

Per il corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche viene proposto il seguente testo:

“Gli insegnamenti offerti nelle attività affini ed integrative sono mirati a migliorare la preparazione interdisciplinare e ad esaminare tematiche non trattate negli insegnamenti di base e caratterizzanti. Tuttavia, nelle attività affini ed integrative potranno figurare anche SSD già presenti tra le attività di base e caratterizzanti, data la molteplicità delle tematiche presenti nei diversi SSD.

Questi insegnamenti consentono allo studente di acquisire conoscenze e competenze fondamentali per l'inserimento nel mondo del lavoro, nei diversi settori della chimica, o della ricerca.”

Il dott. Palladino chiede un chiarimento, a cui risponde il Presidente.

Il Presidente pone in approvazione.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

11. Doppio titolo tra Scienze Chimiche (LM-54) e Master in “Integrative Chemistry and Innovation” Chimie ParisTech PSL

Si informa che è pervenuta una proposta d'accordo dalla prof.ssa Anna Maria Papini per il doppio titolo di Laurea Magistrale LM-54 e Master in “Integrative Chemistry and Innovation” tra l'Università degli Studi di Firenze e Chimie ParisTech PSL.

La prof.ssa Anna Maria Papini illustra brevemente l'accordo.

Il Corso di Laurea in Scienze Chimiche è chiamato ad approvare la convenzione, riportata nei documenti che sono stati inviati per posta elettronica a tutti i componenti del CdS (ALLEGATO II).

Il Presidente pone in approvazione.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

12. Attività didattica integrativa ricercatori A.A. 2022-2023

Il Consiglio di Corso di Studio deve proporre ai Dipartimenti di afferenza dei ricercatori le attività didattiche integrative. Viene posto in approvazione la tabella con le attività didattiche integrative che i ricercatori svolgeranno presso il CdS in Chimica e Scienze Chimiche ed inviata per posta elettronica a tutti i componenti del CdS (ALLEGATO I).

Il Presidente pone in approvazione.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

13. Richieste attività didattica integrativa di dottorandi

Il Prof. Massimo Innocenti, chiede che il dott. Marco Bonechi (iscritto al XXXVII ciclo del Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche) possa svolgere n. 40 ore di attività didattica integrativa nel periodo dal 23/04/2022 al 06/06/2022 (secondo semestre dell'A.A. 2021–2022) per il corso di insegnamento B006882 – LABORATORIO DI CHIMICA ANALITICA II (Cognomi A-K) di cui è titolare.

Il Presidente pone in approvazione.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

Il Prof. Massimo Innocenti, chiede che la dott.ssa Margherita Verrucchi (iscritta al XXXVII ciclo del Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche) possa svolgere n. 40 ore di attività didattica integrativa nel periodo dal 23/04/2022 al 06/06/2022 (secondo semestre dell'A.A. 2021–2022) per il corso di insegnamento B006882 – LABORATORIO DI CHIMICA ANALITICA II (Cognomi A-K) di cui è titolare.

Il Presidente pone in approvazione.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

La prof.ssa Tania Martellini, chiede che la dott.ssa Chiara Sarti (iscritta al XXXVII ciclo del Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche) possa svolgere n. 40 ore di attività didattica integrativa nel periodo 22/02/2022 al 14/06/2022 (secondo semestre dell'A.A. 2021–2022) per il corso di insegnamento B006860 – LABORATORIO DI CHIMICA ANALITICA I (COGNOMI M-P) di cui è titolare.

Il Presidente pone in approvazione.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

La prof.ssa Alessandra Cincinelli, chiede che il dott. Saul Santini (iscritto al XXXVI ciclo del Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche) possa svolgere n. 40 ore di attività didattica integrativa nel periodo 22/02/2022 al 14/06/2022 (secondo semestre dell'A.A. 2021–2022) per il corso di insegnamento B006860 – LABORATORIO DI CHIMICA ANALITICA I (COGNOMI A-C) di cui è titolare.

Il Presidente pone in approvazione.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

La prof.ssa Alessandra Cincinelli, chiede che la dott.ssa Serena Benedetta Cabigliera (iscritta al XXXVII ciclo del Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche) possa svolgere n. 40 ore di attività didattica integrativa nel periodo 22/02/2022 al 14/06/2022 (secondo semestre dell'A.A. 2021–2022) per il corso di insegnamento B006860 – LABORATORIO DI CHIMICA ANALITICA I (COGNOMI A-C) di cui è titolare.

Il Presidente pone in approvazione.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

La prof.ssa Gabriella Caminati, chiede che il dott. Giacomo Lucchesi (iscritto al XXXV ciclo del Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche) possa svolgere n. 20 ore di attività didattica integrativa nel periodo 30/05/2022 al 15/06/2022 (secondo semestre dell'A.A. 2021–2022) per il corso di insegnamento B012849 – CHIMICA FISICA DEI SISTEMI MOLECOLARI ORDINATI di cui è titolare.

Il Presidente pone in approvazione.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

La prof.ssa Francesca Cardona chiede che la dott.ssa. Debora Pratesi (iscritta al XXXV ciclo del Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche) possa svolgere n. 8 ore di attività didattica integrativa nel periodo dal 09/05/2022 al 13/06/2022 (secondo semestre dell'anno accademico 2021 - 2022) per l'insegnamento B012877 - CHIMICA VERDE, di cui è titolare.

Il Presidente pone in approvazione.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

La prof.ssa Francesca Cardona chiede che la dott.ssa. Maria Giulia Davighi (iscritta al XXXV ciclo del Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche) possa svolgere n. 4 ore di attività didattica integrativa nel periodo dal 09/05/2022 al 13/06/2022 (secondo semestre dell'anno accademico 2021 - 2022) per l'insegnamento B012877 - CHIMICA VERDE, di cui è titolare.

Il Presidente pone in approvazione.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

La prof.ssa Ilaria Palchetti chiede che il dott. Patrick Severin Sfragano (iscritto al XXXVI ciclo del Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche) possa svolgere n. 24 ore di attività didattica integrativa nel periodo dal 10/03/2022 al 01/06/2022 (secondo semestre dell'anno accademico 2021 - 2022) per l'insegnamento B012821 – METODI STRUMENTALI IN CHIMICA ANALITICA, di cui è titolare.

Il Presidente pone in approvazione.

Il Consiglio approva all'unanimità dei presenti

14. Varie ed eventuali

Nessuna

La seduta si conclude alle ore 13:07

Presidente: Prof. Marco Pagliai

Segretario: Prof.ssa Carla Bazzicalupi

ALLEGATO I

| Assistenza_lab | Esercitazioni_in_aula | Rel/Corr_LM | Rel/Corr_LT | Tutor/Tirocini | Delegato | Commiss_Istituz | Comm_esame1 | Comm_esame2 | Comm_esame3 | Comm_esame4 | Comm_esame5 | Altro | Docente | IDDocente | SSD | Qualifica | FileCompiti |
|--|--|------------------|-------------|-------------------|---|--|--|---|--|--|---|---|-------------------------|-----------|---------|-----------|-------------|
| | | Scienze Chimiche | Chimica | Scienze Chimiche | | Comm. Strum. Dip. | Chimica fisica per i beni culturali | | | | | | Caminati Gabriella | 20 | CHIM/02 | RTI | |
| | | Scienze Chimiche | Chimica | Chimica | Delegato DICUS per PNRR | Comm. Garanzia di | B012875 - CHIMICA Fisica per i Beni Culturali | | | | | | Chelazzi David | | CHIM/12 | RTD | |
| | | Scienze Chimiche | Chimica | | | | Dispersioni molecolari e | | | | | | Conti Luca | | CHIM/03 | RTD | |
| Methods for decoration of materials and bioconjugation | | | | | | | biostorazioni in Chimica | LABORATORIO DI SINTESI DELLE | | MEMBERS FOR decoration of | | | Francesconi Oscar | | CHIM/06 | RTD | |
| | | Scienze Chimiche | Chimica | Scienze Chimiche | | | Chimica fisica per i beni culturali | | | | | | Mastrangelo Rasangela | | CHIM/02 | RTD | |
| LABORATORIO DI CHIMICA ORGANICA II (Prof. Marradi Prof.ssa Vighianis) LABORATORIO DI CHIMICA | | Scienze Chimiche | Chimica | | | Membro della Giunta del Dipartimento | LABORATORIO DI CHIMICA ORGANICA II E LABORATORIO DI CHIMICA | B012877 - CHIMICA VERDE (Prof.ssa Cardona) | B024521 - CHIMICA ORGANOMETALLICA (Prof. Gab) | B012604 - STEREOSELETTIVITA' IN SINTESI ORGANICA (Prof. Cardona) | B006871 - CHIMICA ORGANICA I E LABORATORIO DI CHIMICA | | Matassini Camilla | | CHIM/06 | RTD | |
| LABORATORIO DI CHIMICA FISICA II (Berti) B006894 | | Scienze Chimiche | Chimica | | | | LABORATORIO DI NANOMATERIALI (Fratini) B016298 | CHIMICA FISICA DEI NANOSISTEMI (Berti) B012845 | | | | | Montis Costanza | | CHIM/02 | RTD | |
| | | Scienze Chimiche | Chimica | Chimica | | | B006856 - CHIMICA ANALITICA I E LABORATORIO DI CHIMICA ANALITICA I | | | | | | Palladino Pasquale | | CHIM/01 | RTD | |
| | | | | | | Membro della Giunta del Dipartimento | MAGNETISMO MOLECOLARE B020967 | | | | | | Perfetti Mauro | | CHIM/03 | RTD | |
| | | | | Laurea in Chimica | Delegato alla Formazione studenti per la | | Fotochimica B012833 | Spettroscopia Molecolare (Bini) B012699 | | | | | Pietrapertza Giangetano | 76 | CHIM/02 | RTD | |
| LABORATORIO DI NANOMATERIALI (Fratini) B016298 | | Scienze Chimiche | Chimica | Scienze Chimiche | Delegato all'orientamento per i CdS di Scienze Chimiche e Chimica | | LABORATORIO DI NANOMATERIALI (Fratini) B016298 | CHIMICA E TECNOLOGIA DEI MATERIALI (Montis) B006901 | METHODS AND MATERIAL FOR CULTURAL HERITAGE CONSERVATION (Zabala) B030596 | | | Tutoraggio a tesi e tirocini (corsi Diagnostica e Materiali e Scienze e Materiali per la Conservazione e il Restauro) | Poggi Giovanna | | CHIM/02 | RTD | |
| Laboratorio di Chimica Organica I | | Scienze Chimiche | Chimica | | | | Stereochimica (Occhiato) B012713 | LABORATORIO DI Chimica Organica | | | | | Scarpi Dina | 86 | CHIM/06 | RTI | |
| LABORATORIO DI CHIMICA ORGANICA I (B006871) modulo | | | | | | | B006871 - CHIMICA ORGANICA I E LABORATORIO DI CHIMICA ORGANICA I | | | | | Assistenza a tesi e tirocini (non specificato) | Tanini Damiano | | CHIM/06 | RTD | |
| | | Scienze Chimiche | Chimica | | | Consiglio Docenti Dottorato di Ricerca | Formative per la | Metabionomia e proteomica | | | | | Tenori Leonardo | | CHIM/03 | RTD | |
| | B031548 (B025) - FISICA II (Prof. Torre) | | | | | | FISICA II (Prof. Torre) | | | | | | Berti Eugenio | | FIS/04 | RTD | |
| Laboratorio di Fisica | | | | | | | Laboratorio di Fisica | Fisica IIB | | | | | Fort Chiara | | FIS/03 | RTI | |
| | | | | | | | B027661 - Fisica IIA | Laboratorio di Fisica | | | | | Lio Giuseppe Emanuele | | FIS/03 | RTD | |
| | | | | | | | B027661 - Fisica IIA | Laboratorio di Fisica | | | | | Parravicini Jacopo | | FIS/03 | RTD | |
| | | | | | | | Calcolo numerico e Programmazione - | | | | | | Bracco Cesare | | MAT/08 | RTD | |
| | | | | | | | MATEMATICA II (B006854), Prof.ssa | | | | | | Lucardesi Ilaria | | MAT/05 | RTD | |
| | | | | | | Membro della Giunta del Dipartimento | MATEMATICA I B015496 (Prof. Cardona) | | | | | | Rotundo Nella | | MAT/07 | RTD | |

ALLEGATO II



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
FIRENZE

ACCORDO DI COOPERAZIONE

per l'istituzione del doppio titolo

di "Master en Integrative Chemistry and Innovation" e di Laurea Magistrale (LM-54)

tra

L'Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris (11 rue Pierre et Marie Curie - 75231 Paris Cedex 05, Francia), rappresentata dal suo direttore, il signor Christian LERMINIAUX, e qui di seguito denominata "Chimie ParisTech-PSL",

L'Université Paris Sciences et Lettres (60, rue Mazarine - 75005 Parigi, Francia), rappresentata dal suo presidente, il sig. Alain FUCHS, e qui di seguito denominata "Université PSL", in quanto tale e venendo ai diritti come procuratore di:

L'Ecole normale supérieure, qui di seguito denominata "ENS-PSL";

L'Ecole Supérieure de Physique et de Chimie de la Ville de Paris, di seguito denominata "ESPCI Paris-PSL".

E

L'Università degli studi di Firenze, (Piazza San Marco, 4 - 50121 Firenze, Italia), rappresentata dalla sua Rettore Prof.ssa Alessandra PETRUCCI

Visti

per l'Université PSL, Chimie ParisTech-PSL, ENS-PSL e ESPCI Paris-PSL :

- il Decreto n. 2019-1130 del 5 novembre 2019 che crea l'Université Paris sciences et lettres (Université PSL) e approva il suo statuto.

- gli articoli da D613-17 a D613-25 del codice dell'istruzione francese, sottosezione 2: diplomi con partenariato internazionale;

- il decreto del dd/mm/yyyy che accredita l'Università PSL per il rilascio del titolo di “Master in “Integrative Chemistry and Innovation”
- la delibera n° 52/2019 del Consiglio di Amministrazione dell'Università PSL del 19 dicembre 2019 che istituisce il corso di laurea in “Chimie”.
- il Decreto n° 2015-1286 del 14 ottobre 2015 relativo all' “Ecole nationale supérieure de chimie de Paris”
- il Decreto n° 2013-1140 del 9 dicembre 2013 relativo all' “Ecole Normale Supérieure”
- la Delibera 2005 DASCO 139-1 del “Conseil de Paris” dell'11 e 12 luglio 2005 relativa alla creazione di un'ente con autonoma finanziaria e giuridica incaricata della gestione dell'ESPCI Paris-PSL.

Visto

per l'Università degli studi di Firenze:

- il DM n. 270 del 22 ottobre 2004, "Modifiche al regolamento recante norme concernenti l'autonomia didattica degli atenei, approvato con decreto del Ministro dell'università e della ricerca scientifica e tecnologica 3 novembre 1999, n. 509", che prevede all'art. 3, comma 10, che, sulla base di appositi accordi, le università italiane possano rilasciare titoli congiuntamente con università italiane o straniere;
- l'articolo 6, comma 2, del suddetto decreto che stabilisce che per essere ammessi al corso di "Laurea Magistrale" è necessario essere in possesso di una laurea triennale o di un diploma universitario che attesti un minimo di tre anni di studio (180 ECTS) o di un altro titolo di studio conseguito all'estero, approvato essere idoneo, e che l'università stabilisca specifici criteri di accesso che soddisfino le esigenze richieste dall'insegnamento;
- la nota MIUR n. 17 del 16 febbraio 2011, che stabilisce che i corsi internazionali presso le università italiane si dividono in due tipologie: a) quelli che rilasciano titoli congiunti e b) quelli per i quali, oltre al titolo nazionale, è previsto il rilascio del titolo dell'università partner;

Concordano l'istituzione di un doppio titolo di “Master in Integrative Chemistry and Innovation” del “Programme Gradué Chimie” dell'Università PSL gestito da “Chimie ParisTech-PSL” (sostenuto da Chimie ParisTech-PSL, ESPCI Paris-PSL e ENS-PSL) e di Laurea Magistrale (LM-54) dell'Università degli studi di Firenze.

1. Scopo dell'accordo

L'obiettivo del doppio titolo è quello di favorire la mobilità degli studenti nello spazio europeo dell'istruzione superiore, offrendo una formazione di qualità, promuovendo una migliore comprensione interculturale.

Le istituzioni contraenti si accordano per offrire un programma di doppio titolo organizzato rispettivamente da “Chimie ParisTech-PSL” e dall'Università degli studi di Firenze.

Si prevede un corso integrato associato a una procedura comune di selezione degli studenti che sottolinei l'eccellenza dei candidati e la loro capacità ad intraprendere successivamente studi nell'ambito di corsi o scuole di dottorato. Si rivolge in particolare, ma non esclusivamente, agli studenti iscritti ai seguenti corsi:

Per l'Università PSL:

- di "Master in Integrative Chemistry and Innovation" del "Programme Gradué Chimie" dell'Università PSL;
- del programma di "ingénieur" di Chimie ParisTech-PSL;
- del programma "Advanced Master in Science & Technology" dell'ESPCI Paris-PSL;
- del corso del dipartimento di chimica dell'ENS che porta all'ottenimento del "Diplôme de l'ENS" (DENS)

Per l'Università degli studi di Firenze:

- al corso di Laurea Magistrale (LM-54) ed in particolare:
 - in Scienze Chimiche
- o
- in "Advanced Molecular Sciences"

Nell'ambito di questo programma, il titolo di "Master in Integrative Chemistry and Innovation" rilasciato dall'Università PSL e di Laurea Magistrale (LM-54) rilasciato dall'Università degli studi di Firenze saranno rilasciati in ciascuna istituzione agli studenti che soddisfaranno le condizioni descritte di seguito.

2. Coordinamento del programma e selezione degli studenti

L'Università PSL e l'Università degli studi di Firenze nominano ciascuna un "coordinatore accademico" responsabile del doppio titolo delegati dalla loro istituzione. Il coordinatore accademico è in particolare responsabile della diffusione delle informazioni sul programma di doppio titolo all'interno della sua istituzione, mettendo i candidati in contatto con il loro possibile tutore, raccogliendo i documenti delle candidature, monitorando gli studenti in mobilità sia in entrata che in uscita, organizzando la trasmissione dei loro voti alla loro istituzione di origine e contribuendo alla valutazione del programma a livello locale.

Ognuna delle parti ha il diritto di cambiare il suo coordinatore accademico, avendo cura di informare l'istituzione partner via e-mail tramite gli uffici delle relazioni internazionali.

Ogni coordinatore accademico definisce con la sua controparte i criteri di selezione degli studenti, esamina le domande e notifica l'ammissione degli studenti, secondo i regolamenti e le procedure in vigore in ciascuna delle istituzioni.

Prende l'iniziativa nella ricerca di finanziamenti. Valuta i risultati della formazione e fa proposte per il suo sviluppo e miglioramento.

I coordinatori accademici si incontrano almeno una volta all'anno, anche in videoconferenza.

2.1. La Scuola di Scienze MMFFNN della Laurea Magistrale (LM-54) dell'Università degli studi di Firenze organizza ogni anno un bando riservato agli studenti iscritti al primo anno del corso di Scienze Chimiche o "Advanced Molecular Sciences". I coordinatori accademici (vedi art. 5.9) dei due corsi di studio selezioneranno un massimo di cinque (5) studenti dell'Università degli studi di Firenze. I criteri di selezione terranno conto dell'eccellenza accademica.

2.2.1. Il Consiglio del "Master in Integrative Chemistry and Innovation" del "Programme Gradué" dell'Università PSL organizza ogni anno un bando riservato agli studenti iscritti al primo anno (M1) per intraprendere una mobilità per studio a livello europeo o internazionale al secondo anno (M2).

2.2.2. Chimie ParisTech-PSL organizza ogni anno un bando di concorso riservato agli studenti "ingénieurs" del secondo anno per una mobilità di studio a livello europeo o internazionale al terzo anno.

2.2.3. ESPCI Paris-PSL organizza ogni anno un bando di concorso riservato agli studenti del terzo anno per una mobilità di studio a livello europeo o internazionale al quarto anno.

2.2.4. L'ENS-PSL organizza un bando annuale per gli studenti del terzo anno iscritti al programma di chimica dell'ENS.

2.2.5. I coordinatori accademici (vedi art. 5.9) dei programmi selezioneranno un massimo di cinque (5) studenti dell'Università PSL. I criteri di selezione terranno conto dell'eccellenza accademica.

2.3 Ad ogni studente selezionato da un'istituzione saranno assegnati due (2) supervisor accademici (uno in ogni istituzione) incaricati di monitorare l'attività dello studente al fine di garantire una coerenza ottimale con il programma. Il parere favorevole del supervisore secondario è richiesto per l'ammissione.

3. Organizzazione degli studi

3.1 Iscrizione amministrativa

Gli studenti pagano le loro tasse d'iscrizione ad una sola delle istituzioni partner (l'istituzione di origine in cui si applicano) e sono esentati dal pagarle nell'altra, fatte salve le tasse fisse imposte dalla legislazione applicabile in quella istituzione.

Tutti gli studenti che partecipano al percorso devono avere una copertura assicurativa adeguata per tutta la durata del loro soggiorno in entrambe le istituzioni. Se la copertura assicurativa fornita dal paese d'origine non risultasse essere sufficiente, lo studente dovrà sottoscrivere un'assicurazione complementare in conformità con le norme del paese ospitante.

3.2 Organizzazione della mobilità e supervisione degli studenti

La mobilità nell'istituzione partner dà luogo alla redazione di un piano di studi basato sul modello utilizzato nel programma Erasmus+ ("Learning agreement").

Il supervisore principale definisce un piano di studi con il candidato in accordo con il supervisore secondario nell'istituzione ospitante.

Ogni supervisore, sia primario che secondario, segue personalmente lo studente per tutto il tempo in cui lo studente si trova nella sua istituzione. Il supervisore primario è mantenuto informato dal supervisore secondario sulle attività dello studente mentre lo studente è nell'istituzione ospitante.

Ogni istituzione deve facilitare l'accoglienza degli studenti che riceve attraverso i servizi forniti dalle relazioni internazionali e dai corsi di studio.

3.3. Convalida degli esami e discussione della tesi di laurea

3.3.1. Studenti dell'Università degli studi di Firenze

Gli studenti iscritti al primo anno presso l'Università degli studi di Firenze rimangono studenti di questa istituzione per tutta la durata del corso di laurea. Una volta ottenuti i 60 ECTS del primo anno della Laurea Magistrale, devono ottenere gli ulteriori 60 ECTS (compresi i 30 ECTS relativi alla prova finale: lavoro sperimentale) del secondo anno del "Master" dell'Université PSL secondo le regole in vigore in ogni istituzione. Saranno regolarmente iscritti al "Master in Integrative Chemistry and Innovation" di Chimie ParisTech-PSL.

Alla fine di questi due anni di formazione (un anno all'Università degli studi di Firenze e un anno all'Università PSL) gli studenti otterranno il titolo di "Master in Integrative Chemistry and Innovation" dell'Università PSL, gestito da Chimie ParisTech-PSL, e la Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM 54) o Laurea Magistrale in "Advanced Molecular Sciences" (LM 54) dell'Università degli studi di Firenze, a seconda della loro iscrizione al primo anno presso l'Università degli studi di Firenze.

3.3.2. Studenti "Ingénieurs" di Chimie ParisTech-PSL

Gli studenti iscritti al secondo anno a Chimie ParisTech-PSL rimangono studenti di questa istituzione per tutta la durata del corso. Una volta ottenuti i 120 ECTS nel corso dei primi due anni, gli studenti devono ottenere 60 ECTS, di cui 30 ECTS relativi alla Prova finale: lavoro sperimentale della Laurea Magistrale (LM 54) in Scienze Chimiche o relativi a "Final examination: experimental work" della Laurea Magistrale (LM 54) in "Advanced Molecular Sciences" dell'Università degli studi di Firenze, secondo la loro scelta al momento della domanda e secondo le regole in vigore in ogni istituzione. Saranno regolarmente iscritti alla Laurea Magistrale (LM 54) presso l'Università degli studi di Firenze.

Alla fine di questi due anni di formazione (2° anno di "ingénieur" a Chimie ParisTech-PSL e poi Laurea Magistrale (LM 54) all'Università degli studi di Firenze), otterranno il titolo di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM 54) o di Laurea Magistrale in "Advanced Molecular Sciences" (LM 54) dell'Università degli studi di Firenze e il diploma di "Ingénieur" di Chimie ParisTech-PSL.

3.3.3. Studenti "ingénieurs" di ESPCI-PSL

Gli studenti iscritti al terzo anno dell'ESPCI Paris-PSL rimangono studenti di questa istituzione per tutta la durata della preparazione del "diplôme d'ingénieur". Una volta ottenuti i 60 ECTS del terzo anno di "ingénieur", gli studenti devono ottenere i 60 ECTS, di cui 30 ECTS relativi alla Prova finale: lavoro sperimentale della Laurea Magistrale (LM 54) in Scienze Chimiche o relativi a "Final examination: experimental work" della Laurea Magistrale (LM 54) in "Advanced Molecular Sciences" dell'Università degli studi di Firenze, secondo la loro scelta al momento della domanda e secondo le regole in vigore in ogni istituzione. Saranno regolarmente iscritti alla "Laurea Magistrale in Scienze Chimiche" (LM 54) o alla "Laurea Magistrale in Scienze Molecolari Avanzate" (LM 54) dell'Università degli studi di Firenze.

Al termine di questi due anni di corso (terzo anno presso ESPCI Paris-PSL e poi Laurea Magistrale (LM 54) presso l'Università degli studi di Firenze), gli studenti otterranno il diploma di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM 54) o Laurea Magistrale in "Advanced Molecular Sciences" dell'Università degli studi di Firenze e il titolo "Advanced Master in Science and Technology" di ESPCI Paris - PSL.

3.3.4 Studenti dell'ENS-PSL

Gli studenti iscritti al terzo anno all'ENS-PSL (corso del "diplome de l'ENS-PSL", di seguito "DENS") rimangono studenti di questa istituzione per tutta la durata del corso (iscrizione scaglionata al DENS). Gli studenti fanno domanda per il doppio titolo durante il loro terzo anno secondo un calendario stabilito dal Dipartimento di Chimica dell'ENS. Devono ottenere i 60 ECTS di cui 30 ECTS relativi alla Prova finale: lavoro sperimentale della Laurea Magistrale (LM 54) in Scienze Chimiche o relativi a "Final examination: experimental work" della Laurea Magistrale (LM 54) in "Advanced Molecular Sciences" dell'Università degli studi di Firenze, secondo la loro scelta al momento della domanda e secondo le regole in vigore in ogni istituzione. Saranno regolarmente iscritti alla Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM 54) o alla Laurea Magistrale in "Advanced Molecular Sciences" (LM 54) dell'Università degli studi di Firenze e al DENS in differita.

Alla fine di questi due anni di formazione (terzo anno del DENS comprendente un M2) e successivamente Laurea Magistrale (LM 54) presso l'Università degli studi di Firenze, otterranno il diploma di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM 54) o Laurea Magistrale in "Advanced Molecular Sciences" (LM 54) dell'Università degli studi di Firenze. L'ottenimento del DENS rimane assoggettato alle regole in vigore (180 ECTS dei primi tre anni del DENS, incluso un M2 e gli ulteriori 72 ECTS per convalidare il DENS).

3.3.5. Studenti del "Grade de Master" dell'Università PSL

Gli studenti iscritti al secondo anno di Chimie ParisTech-PSL nel "Master in Integrative Chemistry and Innovation" rimangono studenti di questa istituzione per tutta la durata del corso. Una volta ottenuti i 60 ECTS del primo anno del "Master", dovranno ottenere 60 ECTS di cui 30 ECTS relativi alla Prova finale: lavoro sperimentale della Laurea Magistrale (LM 54) in Scienze Chimiche o relativi a "Final examination: experimental work" della Laurea Magistrale (LM 54) in "Advanced Molecular Sciences" dell'Università degli studi di Firenze, secondo la loro scelta al momento della domanda e secondo le regole in vigore in ogni istituzione. Saranno regolarmente iscritti alla Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM 54) o alla Laurea Magistrale in "Advanced Molecular Sciences" (LM 54) dell'Università degli studi di Firenze. In seguito al completamento di questi due anni di corso otterranno il "Diplôme de Grade de Master in Integrative Chemistry and Innovation" magistrale in "Chimica Integrativa e Innovazione" dell'Università PSL e la Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM 54) o Laurea Magistrale in "Advanced Molecular Sciences" (LM 54) dell'Università degli studi di Firenze.

3.3.5. Luogo dove svolgere il lavoro di tesi

Per gli studenti iscritti a questo programma di doppio titolo, il lavoro di tesi (“stage”) può svolgersi in qualsiasi istituzione in Italia, in Francia, in Europa o nel mondo, in conformità con le regole in vigore presso le istituzioni e a condizione che i supervisor primari e secondari convalidino la sede dove svolgere il lavoro di tesi (“stage”) e che l'istituzione primaria dello studente firmi una opportuna convenzione. Gli studenti saranno informati del fatto che è preferibile svolgere il loro lavoro di tesi (“stage”) in uno dei laboratori di ricerca dell'Università PSL o dell'Università degli studi di Firenze su temi di interesse comune tra i gruppi di ricerca delle due istituzioni.

Il lavoro di tesi (“stage”) sarà sotto la responsabilità congiunta del supervisore primario e di quello secondario.

3.3.6. Esame finale

La tesi è redatta in lingua inglese. Un riassunto in francese e in italiano sarà incluso nella tesi.

Prima della discussione, il tutor secondario (correlatore) invia al tutor principale (relatore) un parere sulla tesi.

La discussione della tesi, che è unica, ha luogo o nell'istituzione di origine o nell'istituzione partner, in accordo con le regole per la composizione delle commissioni delle due istituzioni. Oltre al tutor principale (relatore), il tutor secondario (correlatore) sarà membro della commissione. La sua esatta composizione è determinata congiuntamente dalle due istituzioni. La lingua della discussione è l'inglese.

4. Rilascio del doppio titolo

Dopo la discussione della tesi, ogni istituzione si impegna a conferire il titolo di “Master” in “Integrative Chemistry and Innovation” o Laurea Magistrale (LM 54) agli studenti che hanno soddisfatto tutte le condizioni per l'ottenimento e il rilascio di tali titoli.

L'Università PSL rilascia il “Master in Integrative Chemistry and Innovation” agli studenti iscritti al programma di doppio titolo e provenienti dall'Università degli studi di Firenze, in conformità con il suo regolamento in vigore.

L'Università degli studi di Firenze rilascia il titolo di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM 54) o di Laurea Magistrale in “Advanced Molecular Sciences” (LM 54) dell'Università degli studi di Firenze agli studenti iscritti al programma del doppio titolo e provenienti dall'Università PSL, secondo il suo regolamento in vigore e secondo la scelta fatta al momento della domanda.

5. Condizioni generali

5.1. Finanziamento

Le istituzioni partner sviluppano normalmente la loro collaborazione nel quadro del programma europeo Erasmus+. Tutti i partner sono firmatari della Carta Erasmus+, che è il quadro giuridico di questo programma.

I partner decidono di cercare eventualmente altri finanziamenti bilaterali o multilaterali.

L'alloggio, il viaggio e gli altri costi sono a carico degli studenti, a meno che non vengano assegnate borse di studio specifiche.

5.2. Risorse

L'istituzione ospitante fornirà, nell'ambito delle sue possibilità, tutte le strutture materiali possibili per gli studenti coinvolti nel doppio titolo.

Le parti contraenti si impegnano collaborare con le organizzazioni interessate, per facilitare l'organizzazione del programma di doppio titolo e l'accoglienza degli studenti.

5.3. Lingue di insegnamento

La lingua di insegnamento per la Laurea Magistrale in Scienze Chimiche" (LM-54) è l'italiano, per la Laurea Magistrale in "Advanced Molecular Sciences" (LM 54) è l'inglese e per il "Grade de Master PSL" è l'inglese. Gli studenti devono avere un livello B2 nella lingua d'insegnamento del corso scelto.

5.5. A parte le condizioni specifiche di questo protocollo, le regole applicabili sono quelle in vigore in ogni istituzione.

5.6. Le parti firmatarie del presente protocollo si manterranno reciprocamente informate sulle questioni relative al doppio titolo e sulle loro pubblicazioni scientifiche relative a questo programma.

5.7. Qualsiasi modifica di questo protocollo sarà fatta per mezzo di addendum firmati dai rappresentanti legali di entrambe le istituzioni.

5.8. Ogni istituzione nomina un coordinatore accademico per il programma. I rispettivi dipartimenti accademici coinvolti e gli uffici relazioni internazionali si occuperanno degli aspetti amministrativi.

5.9. I coordinatori accademici effettueranno una valutazione annuale del funzionamento del programma al fine di apportare le modifiche necessarie.

5.10. I corsi e i crediti corrispondenti ai corsi di insegnamento in ogni istituzione sono allegati a questo protocollo. Questi possono essere modificati ogni anno anche con l'accordo dei coordinatori accademici designati.

5.11. La risoluzione di qualsiasi controversia relativa all'interpretazione e all'esecuzione del presente protocollo è affidata a un collegio arbitrale composto da tre membri: due membri nominati da ciascuna istituzione e un membro scelto di comune accordo. In caso di controversia, le parti daranno la priorità al collegio arbitrale per risolvere la loro controversia in modo amichevole. In caso di mancata risoluzione della controversia entro tre (3) mesi, la parte più diligente si rivolgerà al tribunale competente.

6. Entrata in vigore, durata e fine

Il presente accordo entra in vigore alla data della firma da parte di tutte le parti contraenti. È valido per un periodo di 4 anni. Alla fine di questo periodo, l'accordo può essere rinnovato di comune accordo mediante un emendamento firmato dai rappresentanti legali di entrambe le istituzioni. La mobilità degli studenti in corso non sarà influenzata dalla scadenza dell'accordo.

Annualmente, le parti hanno la possibilità di interrompere la loro collaborazione. Questo sarà notificato ai partner entro il 15 dicembre, con effetto dal 30 settembre dell'anno successivo (per rispettare il calendario accademico). L'eventuale cessazione non influenzerà le attività di collaborazione in corso.

Il presente accordo viene redatto in 4 copie originali, 2 in francese e 2 in italiano, le due versioni linguistiche hanno lo stesso valore legale.

Per l'Università PSL

Il Presidente, Prof. Alain Fuchs

Data :

Per l' « Università degli studi di Firenze »

La Rettore, Prof.ssa Alessandra PETRUCCI

Data :

Per Chimie ParisTech-PSL,

Il Direttore, Prof. Christian LERMINIAUX

ALLEGATO 1 A e B : Modelli di “Learning agreement” da concordare tra le parti per il riconoscimento reciproco delle Attività Formative seguite dagli studenti presso l’ateneo partner

ALLEGATO 2 A e B: Syllabus dei corsi proposti nel 2021-2022 da: A) “Master en Integrative Chemistry and Innovation” e B) di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM-54) e Laurea Magistrale in “Advanced Molecular Sciences” (LM-54) (C).

ALLEGATO 3: Tabella di conversione voti tra sistema francese e sistema italiano

CONVENTION DE COOPERATION

pour la délivrance d'un double diplôme

dans le cadre du grade de Master « Integrative Chemistry and Innovation » et de la « Laurea Magistrale » (LM-54)

entre

L'Ecole nationale supérieure de Chimie de Paris (11 rue Pierre et Marie Curie – 75231 Paris Cedex 05, France), représentée par son Directeur, M. Christian LERMINIAUX, et ci-après désignée « Chimie ParisTech-PSL »,

L'Université Paris Sciences et Lettres (60, rue Mazarine – 75005 Paris, France), représentée par son Président, M. Alain FUCHS, et ci-après désignée « Université PSL », en tant que tel et venant aux droits en tant que mandataire de :

L'Ecole normale supérieure, ci-après désignée « ENS-PSL » ;

L'Ecole supérieure de physique et de chimie de la ville de Paris ci-après désignée « ESPCI Paris-PSL » .

Et

L'Università' Degli Studi Di Firenze, (Piazza San Marco, 4 – 50121 Firenze, Italie), représentée par son Recteur Prof.ssa Alessandra PETRUCCI, et ci-après désignée « Université de Florence »,

Vu, pour l'Université PSL, Chimie ParisTech-PSL, ENS-PSL et ESPCI Paris-PSL :

- le décret n° 2019-1130 du 5 novembre 2019 portant création de l'Université Paris sciences et lettres (Université PSL) et approbation de ses statuts.
- les articles D613-17 à D613-25 du code de l'éducation français, sous-section 2 : diplômes en partenariat international ;
- l'arrêté du XXXXX accréditant l'Université PSL en vue de la délivrance du grade de Master « Integrative Chemistry and Innovation »
- la délibération n° 52/2019 du conseil d'administration de l'Université PSL du 19 décembre 2019 créant le programme gradué « Chimie ».
- le décret n° 2015-1286 du 14 octobre 2015 relatif à l'Ecole nationale supérieure de chimie de Paris
- le décret n° 2013-1140 du 9 décembre 2013 relatif à l'Ecole Normale Supérieure
- la délibération 2005 DASCO 139-1 du Conseil de Paris en date des 11 et 12 juillet 2005 relative à la création d'une régie à autonomie financière et personnalité morale chargée de la gestion de l'ESPCI Paris-PSL.

Vu, pour l' « Università degli studi di Firenze » :

- le DM n. 270 du 22 octobre 2004, « Modifiche al regolamento recante norme concernenti l'autonomia didattica degli atenei, approvato con decreto del Ministro dell'università e della ricerca scientifica e tecnologica 3 novembre 1999, n. 509 », qui prévoit à l'art. 3, alinéa 10, que, sur la base

de conventions adéquates, les universités italiennes peuvent délivrer des diplômes conjointement avec des universités italiennes ou étrangères ;

- l'article 6 alinéa 2 du décret précité, lequel prévoit que pour être admis au cours de « *Laurea Magistrale* » il faut être titulaire d'un diplôme de « Laurea triennale » ou d'un diplôme universitaire sanctionnant des études d'une durée minimale de trois ans (180 ECTS) ou un autre titre d'études obtenu à l'étranger, agréé idoine et que l'université établit des critères d'accès spécifiques qui doivent satisfaire aux conditions requises par l'enseignement ;
- la note MIUR n. 17 du 16.02.2011 dans laquelle il est précisé que les cours internationaux des universités italiennes sont divisés en deux types : a) ceux qui délivrent des diplômes conjoints et b) ceux pour lesquels, en plus du diplôme national, il est prévu que le titre de l'université partenaire soit délivré ;

Convient de l'établissement d'un double diplôme impliquant le grade de Master « Integrative Chemistry and Innovation » du Programme Gradué « Chimie » de l'université PSL (porté par Chimie ParisTech-PSL, ESPCI Paris-PSL et ENS-PSL) opéré par Chimie ParisTech-PSL et de la « Laurea Magistrale » (LM-54) de l'« Università degli studi di Firenze ».

1. Objet de la Convention

Le double diplôme vise à favoriser la mobilité des étudiants dans l'espace européen de l'enseignement supérieur, par une offre de formation de qualité et la promotion d'une meilleure compréhension interculturelle.

Les institutions contractantes s'accordent pour proposer un programme de double diplôme organisé respectivement par Chimie ParisTech-PSL et l'« Università degli studi di Firenze ».

Il prévoit un cursus intégré associé à une procédure commune de sélection des étudiants qui met l'accent sur l'excellence des candidats et sur leur capacité à entreprendre ultérieurement des études doctorales. Il s'adresse tout particulièrement, mais non exclusivement, aux étudiants inscrits dans les formations suivantes :

Pour l'Université PSL :

- au grade de Master « Integrative Chemistry and Innovation » du Programme Gradué « Chimie » de l'Université PSL ;
- au cursus ingénieur de Chimie ParisTech-PSL ;
- au cursus « Advanced Master in Science & Technology » de l'ESPCI Paris-PSL ;
- au cursus du département de chimie de l'ENS donnant lieu à l'obtention du diplôme de l'ENS (DENS)

Pour l'Università Degli Studi Di Firenze:

- au grade de « Laurea Magistrale » (LM-54) et en particulier:
- au cursus « Scienze Chimiche »
ou
- au cursus « Advanced Molecular Sciences »

En vertu de ce programme, le grade de master « Integrative Chemistry and Innovation » délivré par l'Université PSL et le diplôme de « Laurea Magistrale » (LM-54) délivré par l'« Università degli studi di Firenze » seront attribués dans chaque institution aux étudiants qui rempliront les conditions décrites ci-après.

2. Coordination du programme et sélection des étudiants

L'Université PSL et l'« Università degli studi di Firenze » désignent chacune un "coordinateur académique" chargé du suivi du double diplôme au nom de son établissement. Le coordinateur académique est notamment chargé de diffuser l'information relative au master à l'intérieur de son établissement, de mettre

les candidats en relation avec leur éventuel tuteur, de collecter les dossiers de candidatures, de suivre les étudiants en mobilité, tant entrants que sortants, de transmettre leurs notes à leur établissement d'origine, et de contribuer sur le plan local à l'évaluation de la formation.

Chacune des parties est en droit de changer de coordinateur académique, en ayant soin d'en avertir l'établissement partenaire par email provenant des bureaux des relations internationales.

Chaque coordinateur académique définit avec son homologue les critères de sélection des étudiants, examine les candidatures et notifie l'admission des étudiants, conformément à la réglementation et aux procédures en vigueur dans chacun des établissements.

Il prend l'initiative de la recherche de financements. Il évalue les résultats de la formation et fait des propositions pour son évolution et son perfectionnement.

Les coordinateurs académiques se réunissent au moins une fois par an, y compris par voie de visioconférence.

2.1. La « Scuola di Scienze MMFFNN » de la « Laurea Magistrale » (LM-54) de l' « Università degli studi di Firenze » organisera un appel à candidatures chaque année réservé aux étudiants inscrits en première année du cursus « Scienze Chimiche » ou du cursus « Advanced Molecular Sciences ». Les coordinateurs académiques (voir art. 5.9) des deux cursus sélectionneront un maximum de cinq (5) étudiants de l' « Università degli studi di Firenze ». Les critères de sélection prendront en compte l'excellence académique.

2.2.1. Le Directoire du Grade de Master « Integrative Chemistry and Innovation » du Programme Gradué de l'Université PSL organise un appel à candidatures chaque année réservé aux étudiants inscrits en première année (M1) pour effectuer une mobilité d'études européenne ou internationale en deuxième année (M2).

2.2.2. Chimie ParisTech-PSL organise un appel à candidatures chaque année réservé aux élèves ingénieurs de 2^e année pour effectuer une mobilité d'études européenne ou internationale en 3^e année.

2.2.3. ESPCI Paris-PSL organise un appel à candidatures chaque année réservé aux élèves 3^e année pour effectuer une mobilité d'études européenne ou internationale en 4^e année.

2.2.4. ENS-PSL organise un appel à candidatures chaque année réservé aux élèves inscrits en 3^e année au cursus de chimie de l'ENS.

2.2.5 Les coordinateurs académiques (voir art. 5.9) des cursus sélectionneront un maximum de cinq (5) étudiants de l'Université PSL. Les critères de sélection prendront en compte l'excellence académique.

2.3. Chaque étudiant sélectionné par une institution se verra attribuer deux (2) superviseurs académiques (un dans chaque institution) en charge du contrôle de l'activité de l'étudiant de manière à assurer une cohérence optimale au programme. L'avis favorable du superviseur secondaire est requis pour l'admission.

3. Organisation des études

3.1. Inscription administrative

Les étudiants acquittent leurs droits d'inscription dans un seul des établissements partenaires (établissement d'origine où ils déposent leurs candidatures) et en sont exonérés dans l'autre, sous réserve d'éventuelles taxes fixes imposées par la législation applicable dans ce même établissement.

Tout étudiant participant au parcours doit bénéficier d'une couverture sociale appropriée pendant la totalité de la durée de séjour dans les deux établissements. Si la couverture sociale assurée par son pays d'origine

n'apparaît pas suffisante, l'intéressé doit s'affilier à un régime complémentaire conformément aux règlements du pays d'accueil.

3.2. Organisation de la mobilité et encadrement des étudiants

Le départ en mobilité dans l'établissement partenaire donne lieu à la rédaction d'un contrat pédagogique rédigé sur le modèle de celui en usage dans le cadre du programme Erasmus+ (« Learning agreement »).

Le superviseur principal définit un programme de formation avec le candidat en liaison avec le superviseur secondaire dans l'établissement d'accueil.

Chaque superviseur, principal ou secondaire, suit personnellement l'étudiant tant que celui-ci se trouve dans son établissement. Le superviseur principal est tenu informé par le tuteur secondaire des travaux de l'étudiant, lorsque celui-ci séjourne dans l'établissement d'accueil.

Chaque institution devra faciliter l'accueil des étudiants qu'elle reçoit par l'intermédiaire de ses services des relations internationales et de scolarité.

3.3. Validation des enseignements et soutenance du mémoire

3.3.1. Les étudiants de l'Université de Florence

Les étudiants inscrits en première année à l'« Università degli studi di Firenze » demeurent étudiants de cette institution pour toute la durée de préparation du diplôme. Une fois obtenus les 60 ECTS de la première année de la Laurea Magistrale, ils doivent obtenir les 60 ECTS (dont 30 ECTS relatifs au stage de fin d'étude) de la deuxième année de Master à l'Université PSL selon les règles en vigueur dans chaque institution. Ils seront régulièrement inscrits au grade de Master « Integrative Chemistry and Innovation » à Chimie ParisTech-PSL.

A l'issue de ces deux années de formation (une année à l'« Università degli studi di Firenze » et une année à l'Université PSL), ils obtiendront le diplôme de grade de Master « Integrative Chemistry and Innovation » de l'Université PSL opéré par Chimie ParisTech-PSL et le diplôme de « Laurea Magistrale in Scienze Chimiche » (LM 54) ou « Laurea Magistrale in Advanced Molecular Sciences » (LM 54) de l'« Università degli studi di Firenze » selon leur inscription en première année à l'« Università degli studi di Firenze ».

3.3.2. Les élèves ingénieurs de Chimie ParisTech-PSL

Les étudiants inscrits en deuxième année à Chimie ParisTech-PSL demeurent étudiants de cette institution pour toute la durée de préparation du diplôme. Une fois obtenus les 120 ECTS de leurs deux premières années d'ingénieur, ils doivent obtenir les 60 ECTS (dont 30 ECTS relatifs au stage de fin d'étude) de la « Laurea Magistrale » (LM 54) soit en « Scienze Chimiche » soit en « Advanced Molecular Sciences » à l'« Università degli studi di Firenze », comme ils auront choisi au moment de la candidature et selon les règles en vigueur dans chaque institution. Ils seront régulièrement inscrits en « Laurea Magistrale » (LM 54) à l'« Università degli studi di Firenze ».

A l'issue de ces deux années de (2^e année d'ingénieur à Chimie ParisTech-PSL puis « Laurea Magistrale » (LM 54) à l'« Università degli studi di Firenze », ils obtiendront le diplôme de « Laurea Magistrale in Scienze Chimiche » (LM 54) ou « Laurea Magistrale in Advanced Molecular Sciences » (LM 54) de l'« Università degli studi di Firenze » et le diplôme d'ingénieur de Chimie ParisTech-PSL.

3.3.3. Les élèves ingénieurs de ESPCI-PSL

Les étudiants inscrits en troisième année ESPCI Paris-PSL demeurent étudiants de cette institution pour toute la durée de préparation du diplôme d'ingénieur. Une fois obtenus les 60 ECTS de troisième année

d'ingénieur, ils doivent obtenir les 60 ECTS (dont 30 ECTS relatifs au stage de fin d'étude) de la « Laurea Magistrale in Scienze Chimiche » (LM-54) ou « Laurea Magistrale in Advanced Molecular Sciences » (LM 54) de l' « Università degli studi di Firenze » selon les règles en vigueur dans chaque institution et comme ils auront choisi au moment de la candidature. Ils seront régulièrement inscrits en « Laurea Magistrale in Scienze Chimiche » (LM 54) ou « Laurea Magistrale in Advanced Molecular Sciences » (LM 54) de l' « Università degli studi di Firenze ».

A l'issue de ces deux années de formation (3^e année à ESPCI Paris-PSL puis « Laurea Magistrale » (LM 54) à l' « Università degli studi di Firenze », ils obtiendront le diplôme de « Laurea Magistrale in Scienze Chimiche » (LM 54) ou « Laurea Magistrale in Advanced Molecular Sciences » (LM 54) de l' « Università degli studi di Firenze » et le diplôme « Advanced Master in Science and Technology » de l'ESPCI Paris - PSL.

3.3.4 Les étudiants de l'ENS-PSL

Les étudiants inscrits en troisième année à ENS-PSL (cursus du diplôme de l'ENS-PSL, ci-après « DENS ») demeurent étudiants de cette institution pour toute la durée de préparation du diplôme (inscription en étalement au DENS). La candidature au double diplôme se fait en cours de 3^e année selon un calendrier mis en place par le département de chimie de l'ENS. Ils doivent obtenir les 60 ECTS (dont 30 ECTS relatifs au stage de fin d'étude) de la « Laurea Magistrale in Scienze Chimiche » (LM-54) ou « Laurea Magistrale in Advanced Molecular Sciences » (LM 54) de l' « Università degli studi di Firenze », selon les règles en vigueur dans chaque institution et comme ils auront choisi au moment de la candidature. Ils seront régulièrement inscrits en « Laurea Magistrale in Scienze Chimiche » (LM 54) ou « Laurea Magistrale in Advanced Molecular Sciences » (LM 54) de l' « Università degli studi di Firenze » et au DENS en étalement de scolarité.

A l'issue de ces deux années de formation (3^e année du DENS comportant un M2) puis « Laurea Magistrale » (LM 54) à l' « Università degli studi di Firenze », ils obtiendront le diplôme de « Laurea Magistrale in Scienze Chimiche » (LM 54) ou « Laurea Magistrale in Advanced Molecular Sciences » (LM 54) de l' « Università degli studi di Firenze ». L'obtention du DENS reste assujettie aux règles en vigueur (180 ECTS de leurs trois premières années du DENS dont un M2 et les 72 ECTS complémentaires pour valider le DENS).

3.3.5. Les étudiants du Grade de Master de l'Université PSL

Les étudiants inscrits en deuxième année à Chimie ParisTech-PSL dans le grade de master « Integrative Chemistry and Innovation » demeurent étudiants de cette institution pour toute la durée de préparation du diplôme. Une fois obtenus les 60 ECTS de leurs première année de Master, ils doivent obtenir les 60 ECTS (dont 30 ECTS relatifs au stage de fin d'étude) de la « Laurea Magistrale in Scienze Chimiche » (LM-54) ou « Laurea Magistrale in Advanced Molecular Sciences » (LM 54) de l' « Università degli studi di Firenze », selon les règles en vigueur dans chaque institution et comme ils auront choisi au moment de la candidature. Ils seront régulièrement inscrits en « Laurea Magistrale in Scienze Chimiche » (LM 54) ou « Laurea Magistrale in Advanced Molecular Sciences » (LM 54) de l' « Università degli studi di Firenze ».

A l'issue de ces deux années de formation, ils obtiendront le diplôme de grade de Master « Integrative Chemistry and Innovation » de l'Université PSL et de « Laurea Magistrale in Scienze Chimiche » (LM 54) ou « Laurea Magistrale in Advanced Molecular Sciences » (LM 54) de l' « Università degli studi di Firenze ».

3.3.5. Lieu du stage

Pour les élèves inscrits dans ce programme, le stage pourra avoir lieu dans n'importe quelle institution en Italie, en France, en Europe ou dans le monde, conformément aux règles en vigueur des établissements et dans la mesure où les superviseurs principal et secondaire valident le lieu du stage et où l'établissement d'inscription signe la convention de stage. Les étudiants seront sensibilisés au fait de privilégier le déroulement de leur stage dans un des laboratoires de recherche de l'Université PSL ou de l' « Università degli studi di Firenze » sur des sujets d'intérêts commun entre les équipes des deux établissements.

Le stage est sous la responsabilité conjointe des superviseurs principal et secondaire.

3.3.6. Soutenance du stage

Le mémoire est rédigé en anglais. Un résumé substantiel est rédigé en français et en italien.

Avant la soutenance, le tuteur secondaire (« correlatore ») envoie au tuteur principal (« relatore ») un avis sur le mémoire.

La soutenance du mémoire, unique, a lieu soit dans l'établissement d'origine, soit dans l'établissement partenaire, en conformité avec les règles de constitution des jurys des deux établissements. Outre le tuteur principal, le tuteur secondaire est également membre du jury. Sa composition exacte est déterminée conjointement par les deux établissements. La langue de soutenance est l'anglais.

4. Délivrance du double diplôme

Suite à la soutenance d'un mémoire, chaque institution s'engage à conférer le grade de Master en « Integrative Chemistry and Innovation » ou de « Laurea Magistrale » (LM 54) aux étudiants qui auront satisfaits à toutes les conditions d'obtention et de délivrance dudit diplôme.

L'Université PSL délivre aux étudiants inscrits au programme d'échange et venus de l'« Università degli studi di Firenze » le grade de Master en « Integrative Chemistry and Innovation », en conformité avec sa réglementation en vigueur

L'« Università degli studi di Firenze » délivre aux étudiants inscrits au programme d'échange et venus de l'Université PSL le diplôme de « Laurea Magistrale in Scienze Chimiche » (LM 54) ou « Laurea Magistrale in Advanced Molecular Sciences » (LM 54) de l'« Università degli studi di Firenze » en conformité avec sa réglementation en vigueur et selon le choix fait au moment de la candidature.

5. Conditions générales

5.1. Financement

Les établissements partenaires développent généralement leur collaboration dans le cadre du programme européen Erasmus+. Tous les partenaires sont signataires de la charte Erasmus+, cadre juridique de ce programme.

Les partenaires décident par ailleurs de rechercher d'autres modes de financement bilatéraux ou multilatéraux.

Les frais d'hébergement et de voyage ainsi que les autres coûts sont à la charge des étudiants, à moins que des allocations d'études spécifiques ne leur soient attribuées.

5.2. Moyens

L'établissement d'accueil, dans la mesure de ses moyens, accordera toutes les facilités matérielles possibles aux étudiants participants à l'échange.

Les cocontractants conviennent de tout mettre en œuvre, en coopération avec les organismes concernés, pour faciliter l'organisation du master, l'accueil des étudiants.

5.3. Langues d'enseignement

La langue d'enseignement pour les cours de la « Laurea Magistrale in Scienze Chimiche » (LM-54) est l'italien, pour la « Laurea Magistrale in Advanced Molecular Sciences » (LM 54) est l'anglais et pour le grade Master PSL est l'anglais. Les étudiants doivent avoir un niveau B2 dans la langue d'enseignement du parcours choisi.

5.5. En dehors des conditions spécifiques du présent protocole, les règles applicables sont celles en vigueur dans chaque institution.

5.6. Les parties prenantes du présent protocole s'informent mutuellement des questions relatives au double diplôme et maintiennent une correspondance régulière sur leurs publications scientifiques relatives à ce programme.

5.7. Toute modification du présent protocole se fera par voie d'avenant signé par les représentants légaux des deux institutions.

5.8. Chaque institution devra désigner un coordinateur académique du programme. Les services des relations internationales et de la scolarité respectifs s'occuperont des aspects administratifs.

5.9. Les coordinateurs académiques réaliseront chaque année une évaluation du fonctionnement du programme dans le but de réaliser les ajustements nécessaires.

5.10. Les enseignements ainsi que les crédits correspondants aux unités d'enseignement dans chaque institution sont annexés au présent protocole. Ces éléments pourront être modifiés chaque année avec l'accord des coordinateurs académiques désignés.

5.11. La résolution d'éventuelles controverses qui concernent l'interprétation et l'exécution de ce protocole est confiée à un collège arbitral composé de trois membres : deux membres désignés par chaque institution et un membre choisi d'un commun accord. En cas de litige, les Parties y feront appel en priorité pour résoudre leur différend à l'amiable. En cas d'échec dans un délai de trois (3) mois, la Partie la plus diligente saisira la juridiction compétente.

6. Entrée en vigueur, durée et résiliation

La présente convention entrera en vigueur à la date de sa signature par toutes les parties contractantes. Elle est valable pour une durée de 4 ans. À l'échéance de cette dernière, la convention pourra être renouvelée d'un commun accord par voie d'avenant signé par les représentants légaux des deux institutions. Les mobilités étudiantes en cours ne seront pas affectées par l'échéance de la convention.

Annuellement, les parties ont la possibilité d'interrompre leur collaboration. Cette volonté sera notifiée aux partenaires au plus tard le 15 décembre, avec effet au 30 septembre de l'année suivante (de manière à respecter le calendrier universitaire). La résiliation éventuelle ne mettra pas en cause les actions de collaboration en cours.

Fait en 4 exemplaires originaux, 2 en français et 2 en italien, les deux versions linguistiques étant d'égale valeur juridique.

Pour l'Université PSL
Le Président, Prof. Alain Fuchs

Date :

Pour l' « Università degli studi di Firenze »
La Rectrice, Prof.ssa Alessandra PETRUCCI

Date :

Pour Chimie ParisTech-PSL,
Le Directeur, Prof. Christian LERMINIAUX

Annexe 1 A et B: Modèles de « Learning Agreement » à rédiger pour reconnaître à l'institution d'origine les activités de formation suivies par les étudiants chez l'institution partenaire

Annexe 2 A et B: Syllabus des cours proposés en 2021-2022 pour le Master en Integrative Chemistry and Innovation” et les cours de “Laurea Magistrale in Scienze Chimiche » (LM-54) et « Laurea Magistrale Advanced Molecular Sciences » (LM-54)

Annexe 3: Tableau de conversion des notes entre système français et italien



Online Learning Agreement

Student Mobility for Studies

Academic Year 20__/__

General information

| | | | | | |
|--|------------------------|--|---------------|--|--|
| Student | Last name(s) | First name(s) | Date of birth | Nationality | Gender |
| | | | | | |
| | ESI | | Study cycle | Field of education (ISCED) | Field of education (clarification) |
| | | | | | |
| Sending Institution | Name | Faculty/Department | Erasmus code | Country | Administrative contact person name; email; phone |
| | | | | | |
| Receiving Institution | Name | Faculty/Department | Erasmus code | Country | Administrative contact person name; email; phone |
| | University of Florence | School of Mathematical, Physical and Natural Sciences/Department of Chemistry "Ugo Schiff" | I FIRENZE01 | Italy viale Morgagni 40-44 Firenze | Beatrice Ferranti: incoming@scienze.unifi.it +39 055 2751341 |
| The level of language competence in _____ [indicate here the main language of instruction] that the student already has or agrees to acquire by the start of the study period is: A1 <input type="checkbox"/> A2 <input type="checkbox"/> B1 <input type="checkbox"/> B2 <input type="checkbox"/> C1 <input type="checkbox"/> C2 <input type="checkbox"/> Native speaker <input type="checkbox"/> | | | | | |

Mobility type and duration

| | |
|--|---|
| Mobility type (select one) | Estimated duration (to be confirmed by the Receiving Institution) |
| <ul style="list-style-type: none"> Semester(s) <input type="checkbox"/> / Virtual component <i>(only if applicable)</i> <input type="checkbox"/> Blended mobility with short-term physical mobility <input type="checkbox"/> Short-term doctoral mobility <input type="checkbox"/> / Virtual component <i>(only if applicable)</i> <input type="checkbox"/> | Planned period of the physical mobility: <ul style="list-style-type: none"> from [day (optional)/month/year] to [day (optional)/month/year] |

Study Programme at the Receiving Institution

Mobility type: Semester(s)

| | | | | |
|--|-------------------------|---|-------------------------------------|--|
| Table A | Component code (if any) | Component title at the Receiving Institution (as indicated in the course catalogue) | Semester [e.g. autumn/spring; term] | Number of ECTS credits (or equivalent) to be awarded by the Receiving Institution upon successful completion |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| Web link to the course catalogue at the Receiving Institution describing the learning outcomes: [web link to the relevant information] | | | | |

Recognition at the Sending Institution

Mobility type: Semester(s)

| Table B | Component code (if any) | Component title at the Sending Institution (as indicated in the course catalogue) | Semester [e.g. autumn/spring; term] | Number of ECTS credits (or equivalent) to be recognised by the Sending Institution | Automatic recognition | |
|---------|-------------------------|---|-------------------------------------|--|-----------------------|--|
| | | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | Total: ... | |

Provisions applying if the student does not complete successfully some educational components: *[web link to the relevant information]*

If applicable, description of the virtual component at Receiving Institution and recognition at the Sending Institution

Mobility type: Semester(s)

| Table C | Component code (if any) | Component title or description of the study programme at the Receiving Institution | Short description of the virtual component (obligatory field): | Number of ECTS credits to be awarded | Automatic recognition | |
|---------|-------------------------|--|--|--------------------------------------|-----------------------|--|
| | | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | Total: ... | |

Study Programme at Receiving Institution and recognition at the Sending Institution

Mobility type: Blended mobility with short-term physical mobility

| | Component code (if any) | Component title or description of the mobility programme | Short description of the virtual component (obligatory field): | Number of ECTS credits to be awarded | Automatic recognition | |
|--|-------------------------|--|--|--------------------------------------|-----------------------|--|
| | | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | Total: ... | |

Study Programme at Receiving Institution and recognition at the Sending Institution

Mobility type: Short-term doctoral mobility

| Component code (if any) | Component title or description of the mobility programme | Short description of the virtual component (optional field): | Number of ECTS credits to be awarded | Automatic recognition |
|-------------------------|--|--|--------------------------------------|--|
| | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | Total: ... | |

Commitment of the three parties

By digitally signing this document, the student, the Sending Institution and the Receiving Institution confirm that they approve the Online Learning Agreement and that they will comply with all the arrangements agreed by all parties. Sending and Receiving Institutions undertake to apply all the principles of the Erasmus Charter for Higher Education relating to mobility for studies. The Beneficiary Institution and the student should also commit to what is set out in the Erasmus+ grant agreement. The Receiving Institution confirms that the educational components listed are in line with its course catalogue or as agreed otherwise and should be available to the student. The Sending Institution commits to recognise all the credits or equivalent units gained at the Receiving Institution for the successfully completed educational components and to count them towards the student's degree. The student and the Receiving Institution will communicate to the Sending Institution any problems or changes regarding the study programme, responsible persons and/or study period.

| Commitment | Name | Email | Position | Date | Digital Signature |
|---|-------------------------|---------------------------|--|------|-------------------|
| Student | | | Student | | |
| Responsible person at the Sending Institution | | | | | |
| Responsible person at the Receiving Institution | Prof. Anna Maria Papini | annamaria.papini@unifi.it | Delegate International Affairs and Erasmus Programme - School of Mathematical, Physical and Natural Sciences | | |

Any Mobility type

Changes to the learning agreement

Mobility type: Semester(s)

| Exceptional changes to Table A (to be digitally approved by the student, the responsible person in the Sending Institution and the responsible person in the Receiving Institution) | | | | | | |
|--|-------------------------|---|--|--------------------------------------|-------------------|--|
| Table A2 | Component code (if any) | Component title at the Receiving Institution (as indicated in the course catalogue) | Deleted component [tick if applicable] | Added component [tick if applicable] | Reason for change | Number of ECTS credits (or equivalent) |
| | | | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | Choose an item. | |
| | | | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | Choose an item. | |

| Exceptional changes to Table B (if applicable) (to be digitally approved by the student and the responsible person in the Sending Institution) | | | | | | | |
|---|-------------------------|---|--|--------------------------------------|-------------------|--|--|
| Table B2 | Component code (if any) | Component title at the Sending Institution (as indicated in the course catalogue) | Deleted component [tick if applicable] | Added component [tick if applicable] | Reason for change | Number of ECTS credits (or equivalent) | Automatic recognition |
| | | | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | Choose an item. | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | Choose an item. | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |

Exceptional changes to Table C (if applicable)

(to be digitally approved by the student and the responsible person in the Sending Institution)

| Table C2 | Component code (if any) | Component title or description of the study programme at the Receiving Institution | Short description of the virtual component (obligatory field): | Reason for change | Number of ECTS credits to be awarded | Automatic recognition |
|----------|-------------------------|--|--|-------------------|--------------------------------------|--|
| | | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |

- In case of changes to the learning agreement for mobility types: Blended mobility with short-term physical mobility or Short-term doctoral mobility, please create a new learning agreement***

Glossary

| Term | Definition/Explanation |
|--|---|
| Nationality | Country to which the person belongs administratively and that issues the ID card and/or passport. |
| The European Student Identifier (ESI) | A unique European Identifier number used to identify and authenticate students using the Erasmus+ Mobile App and/or the desktop version of the app to fill in and sign their online learning agreement. If the sending institution does not issue an ESI for its students an alternative mechanism for identifying and authenticating students can be accepted. For more information, visit the Erasmus Without Paper Competence Centre . |
| Study cycle | Short cycle (EQF level 5) / Bachelor or equivalent first cycle (EQF level 6) / Master or equivalent second cycle (EQF level 7) / Doctorate or equivalent third cycle (EQF level 8). |
| Field of education | The ISCED-F 2013 search tool available at http://ec.europa.eu/education/international-standard-classification-of-education-isc-ed_en should be used to find the ISCED 2013 detailed field of education and training that is closest to the subject of the degree to be awarded to the student by the Sending Institution. |
| Erasmus code | A unique identifier that every higher education institution that has been awarded with the Erasmus Charter for Higher Education (ECHE) receives. It is only applicable to higher education institutions located in Programme Countries. |
| Administrative Contact person | A person who provides a link for administrative information and who, depending on the structure of the higher education institution, may be the departmental coordinator or works at the international relations office or equivalent body within the institution. |
| Mobility type: Semester(s) | A study period abroad lasting at least one academic term/trimester or 2 months to 12 months |
| Blended mobility | Any mobility can be carried out as a “blended mobility” by combining the study period abroad with on virtual component at the receiving institution before, during or after the physical mobility to further enhance the learning outcomes. |
| Short description of a virtual component | An indication of whether the virtual component is an online course(s), embedded in an course(s) selected at the receiving institution, embedded in a blended intensive programme and/or other type of online activity at the receiving institution along with component title(s) or short description of the online activity. |
| Blended mobility with short term physical | If a long-term physical mobility is not suitable, the student may undertake a study period abroad lasting between 5 days and 30 days and combined with a compulsory virtual component to facilitate |

| | |
|--|---|
| mobility | an online learning exchange and/or teamwork. |
| Short-term doctoral mobility | A study period abroad lasting between 5 days and 30 days. An optional virtual component to facilitate an online learning exchange and/or teamwork can be added to further enhance the learning outcomes. |
| ECTS credits (or equivalent) | In countries where the " ECTS " system is not in place, in particular for institutions located in Partner Countries not participating in the Bologna process, "ECTS" needs to be replaced in the relevant tables by the name of the equivalent system that is used, and a web link to an explanation to the system should be added. |
| Automatic recognition | All credits gained abroad– as agreed in the Learning Agreement and confirmed by the Transcript of Records – will be transferred without delay and counted towards the students' degree without any additional work or assessment of the student. This is signalled in the learning agreement by the "Yes" check box. If the "No" check box is selected, a clear justification needs to be provided and an indication on what other type of formal recognition will be applied e.g. registration in the students' diploma supplement or Europass Mobility Document. |
| Educational component | A self-contained and formal structured learning experience that features learning outcomes, credits and forms of assessment. Examples of educational components are: a course, module, seminar, laboratory work, practical work, preparation/research for a thesis, mobility window or free electives. |
| Level of language competence | A description of the European Language Levels (CEFR) is available at: https://europass.cedefop.europa.eu/en/resources/european-language-levels-cefr |
| Course catalogue | Detailed, user-friendly and up-to-date information on the institution's learning environment that should be available to students before the mobility period and throughout their studies to enable them to make the right choices and use their time most efficiently. The information concerns, for example, the qualifications offered, the learning, teaching and assessment procedures, the level of programmes, the individual educational components and the learning resources. The Course Catalogue should include the names of people to contact, with information about how, when and where to contact them. |
| Responsible person at the Sending Institution | An academic who has the authority to approve the Learning Agreement, to exceptionally amend it when it is needed, as well as to guarantee full recognition of such programme on behalf of the responsible academic body. The name and email of the Responsible person must be filled in only in case it differs from that of the Contact person mentioned at the top of the document. |
| Reasons for deleting a component | <ol style="list-style-type: none"> 1. Previously selected educational component is not available at the Receiving Institution 2. Component is in a different language than previously specified in the course catalogue 3. Timetable conflict 4. Other (please specify) |
| Reason for adding a component | <ol style="list-style-type: none"> 5. Substituting a deleted component 6. Extending the mobility period 7. Adding a virtual component 8. Other (please specify) |



Online Learning Agreement

Student Mobility for Studies

Academic Year 20__/__

General information

| | | | | | |
|--|------------------------|--|---------------|--|--|
| Student | Last name(s) | First name(s) | Date of birth | Nationality | Gender |
| | | | | | |
| | ESI | | Study cycle | Field of education (ISCED) | Field of education (clarification) |
| | | | | | |
| Sending Institution | Name | Faculty/Department | Erasmus code | Country | Administrative contact person name; email; phone |
| | University of Florence | School of Mathematical, Physical and Natural Sciences/Department of Chemistry "Ugo Schiff" | I FIRENZE01 | Italy viale Morgagni 40-44 Firenze | Beatrice Ferranti: incoming@scienze.unifi.it +39 055 2751341 |
| Receiving Institution | Name | Faculty/Department | Erasmus code | Country | Administrative contact person name; email; phone |
| | | | | | |
| The level of language competence in _____ [indicate here the main language of instruction] that the student already has or agrees to acquire by the start of the study period is: A1 <input type="checkbox"/> A2 <input type="checkbox"/> B1 <input type="checkbox"/> B2 <input type="checkbox"/> C1 <input type="checkbox"/> C2 <input type="checkbox"/> Native speaker <input type="checkbox"/> | | | | | |

Mobility type and duration

| | |
|--|---|
| Mobility type (select one) | Estimated duration (to be confirmed by the Receiving Institution) |
| <ul style="list-style-type: none"> Semester(s) <input type="checkbox"/> / Virtual component <i>(only if applicable)</i> <input type="checkbox"/> Blended mobility with short-term physical mobility <input type="checkbox"/> Short-term doctoral mobility <input type="checkbox"/> / Virtual component <i>(only if applicable)</i> <input type="checkbox"/> | Planned period of the physical mobility: <ul style="list-style-type: none"> from [day (optional)/month/year] to [day (optional)/month/year] |

Study Programme at the Receiving Institution

Mobility type: Semester(s)

| | | | | |
|--|-------------------------|---|-------------------------------------|--|
| Table A | Component code (if any) | Component title at the Receiving Institution (as indicated in the course catalogue) | Semester [e.g. autumn/spring; term] | Number of ECTS credits (or equivalent) to be awarded by the Receiving Institution upon successful completion |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| Web link to the course catalogue at the Receiving Institution describing the learning outcomes: [web link to the relevant information] | | | | |

Recognition at the Sending Institution

Mobility type: Semester(s)

| Table B | Component code (if any) | Component title at the Sending Institution (as indicated in the course catalogue) | Semester [e.g. autumn/spring; term] | Number of ECTS credits (or equivalent) to be recognised by the Sending Institution | Automatic recognition |
|---------|-------------------------|---|-------------------------------------|--|--|
| | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | Total: ... | |

Provisions applying if the student does not complete successfully some educational components: *[web link to the relevant information]*

If applicable, description of the virtual component at Receiving Institution and recognition at the Sending Institution

Mobility type: Semester(s)

| Table C | Component code (if any) | Component title or description of the study programme at the Receiving Institution | Short description of the virtual component (obligatory field): | Number of ECTS credits to be awarded | Automatic recognition |
|---------|-------------------------|--|--|--------------------------------------|--|
| | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | Total: ... | |

Study Programme at Receiving Institution and recognition at the Sending Institution

Mobility type: Blended mobility with short-term physical mobility

| | Component code (if any) | Component title or description of the mobility programme | Short description of the virtual component (obligatory field): | Number of ECTS credits to be awarded | Automatic recognition |
|--|-------------------------|--|--|--------------------------------------|--|
| | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | Total: ... | |

Study Programme at Receiving Institution and recognition at the Sending Institution

Mobility type: Short-term doctoral mobility

| Component code (if any) | Component title or description of the mobility programme | Short description of the virtual component (optional field): | Number of ECTS credits to be awarded | Automatic recognition |
|-------------------------|--|--|--------------------------------------|--|
| | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | Total: ... | |

Commitment of the three parties

By digitally signing this document, the student, the Sending Institution and the Receiving Institution confirm that they approve the Online Learning Agreement and that they will comply with all the arrangements agreed by all parties. Sending and Receiving Institutions undertake to apply all the principles of the Erasmus Charter for Higher Education relating to mobility for studies. The Beneficiary Institution and the student should also commit to what is set out in the Erasmus+ grant agreement. The Receiving Institution confirms that the educational components listed are in line with its course catalogue or as agreed otherwise and should be available to the student. The Sending Institution commits to recognise all the credits or equivalent units gained at the Receiving Institution for the successfully completed educational components and to count them towards the student's degree. The student and the Receiving Institution will communicate to the Sending Institution any problems or changes regarding the study programme, responsible persons and/or study period.

| Commitment | Name | Email | Position | Date | Digital Signature |
|---|--------------------------------|----------------------------------|---|------|-------------------|
| Student | | | <i>Student</i> | | |
| Responsible person at the Sending Institution | Prof. Anna Maria Papini | annamaria.papini@unifi.it | Delegate International Affairs and Erasmus Programme - School of Mathematical, Physical and Natural Sciences | | |
| Responsible person at the Receiving Institution | | | | | |

Any Mobility type

Changes to the learning agreement

Mobility type: Semester(s)

| Exceptional changes to Table A (to be digitally approved by the student, the responsible person in the Sending Institution and the responsible person in the Receiving Institution) | | | | | | |
|--|-------------------------|---|--|--------------------------------------|-------------------|--|
| Table A2 | Component code (if any) | Component title at the Receiving Institution (as indicated in the course catalogue) | Deleted component [tick if applicable] | Added component [tick if applicable] | Reason for change | Number of ECTS credits (or equivalent) |
| | | | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | Choose an item. | |
| | | | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | Choose an item. | |

| Exceptional changes to Table B (if applicable) (to be digitally approved by the student and the responsible person in the Sending Institution) | | | | | | | |
|---|-------------------------|---|--|--------------------------------------|-------------------|--|--|
| Table B2 | Component code (if any) | Component title at the Sending Institution (as indicated in the course catalogue) | Deleted component [tick if applicable] | Added component [tick if applicable] | Reason for change | Number of ECTS credits (or equivalent) | Automatic recognition |
| | | | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | Choose an item. | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | Choose an item. | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |

Exceptional changes to Table C (if applicable)

(to be digitally approved by the student and the responsible person in the Sending Institution)

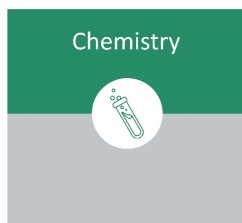
| Table C2 | Component code (if any) | Component title or description of the study programme at the Receiving Institution | Short description of the virtual component (obligatory field): | Reason for change | Number of ECTS credits to be awarded | Automatic recognition |
|----------|-------------------------|--|--|-------------------|--------------------------------------|--|
| | | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |
| | | | | | | Yes <input type="checkbox"/> No <input type="checkbox"/> |

- In case of changes to the learning agreement for mobility types: Blended mobility with short-term physical mobility or Short-term doctoral mobility, please create a new learning agreement***

Glossary

| Term | Definition/Explanation |
|--|--|
| Nationality | Country to which the person belongs administratively and that issues the ID card and/or passport. |
| The European Student Identifier (ESI) | A unique European Identifier number used to identify and authenticate students using the Erasmus+ Mobile App and/or the desktop version of the app to fill in and sign their online learning agreement. If the sending institution does not issue an ESI for its students an alternative mechanism for identifying and authenticating students can be accepted. For more information, visit the Erasmus Without Paper Competence Centre . |
| Study cycle | Short cycle (EQF level 5) / Bachelor or equivalent first cycle (EQF level 6) / Master or equivalent second cycle (EQF level 7) / Doctorate or equivalent third cycle (EQF level 8). |
| Field of education | The ISCED-F 2013 search tool available at http://ec.europa.eu/education/international-standard-classification-of-education-isced_en should be used to find the ISCED 2013 detailed field of education and training that is closest to the subject of the degree to be awarded to the student by the Sending Institution. |
| Erasmus code | A unique identifier that every higher education institution that has been awarded with the Erasmus Charter for Higher Education (ECHE) receives. It is only applicable to higher education institutions located in Programme Countries. |
| Administrative Contact person | A person who provides a link for administrative information and who, depending on the structure of the higher education institution, may be the departmental coordinator or works at the international relations office or equivalent body within the institution. |
| Mobility type: Semester(s) | A study period abroad lasting at least one academic term/trimester or 2 months to 12 months |
| Blended mobility | Any mobility can be carried out as a “blended mobility” by combining the study period abroad with on virtual component at the receiving institution before, during or after the physical mobility to further enhance the learning outcomes. |
| Short description of a virtual component | An indication of whether the virtual component is an online course(s), embedded in an course(s) selected at the receiving institution, embedded in a blended intensive programme and/or other type of online activity at the receiving institution along with component title(s) or short description of the online activity. |
| Blended mobility with short term physical | If a long-term physical mobility is not suitable, the student may undertake a study period abroad lasting between 5 days and 30 days and combined with a compulsory virtual component to facilitate |

| | |
|--|---|
| mobility | an online learning exchange and/or teamwork. |
| Short-term doctoral mobility | A study period abroad lasting between 5 days and 30 days. An optional virtual component to facilitate an online learning exchange and/or teamwork can be added to further enhance the learning outcomes. |
| ECTS credits (or equivalent) | In countries where the " ECTS " system is not in place, in particular for institutions located in Partner Countries not participating in the Bologna process, "ECTS" needs to be replaced in the relevant tables by the name of the equivalent system that is used, and a web link to an explanation to the system should be added. |
| Automatic recognition | All credits gained abroad– as agreed in the Learning Agreement and confirmed by the Transcript of Records – will be transferred without delay and counted towards the students' degree without any additional work or assessment of the student. This is signalled in the learning agreement by the "Yes" check box. If the "No" check box is selected, a clear justification needs to be provided and an indication on what other type of formal recognition will be applied e.g. registration in the students' diploma supplement or Europass Mobility Document. |
| Educational component | A self-contained and formal structured learning experience that features learning outcomes, credits and forms of assessment. Examples of educational components are: a course, module, seminar, laboratory work, practical work, preparation/research for a thesis, mobility window or free electives. |
| Level of language competence | A description of the European Language Levels (CEFR) is available at: https://europass.cedefop.europa.eu/en/resources/european-language-levels-cefr |
| Course catalogue | Detailed, user-friendly and up-to-date information on the institution's learning environment that should be available to students before the mobility period and throughout their studies to enable them to make the right choices and use their time most efficiently. The information concerns, for example, the qualifications offered, the learning, teaching and assessment procedures, the level of programmes, the individual educational components and the learning resources. The Course Catalogue should include the names of people to contact, with information about how, when and where to contact them. |
| Responsible person at the Sending Institution | An academic who has the authority to approve the Learning Agreement, to exceptionally amend it when it is needed, as well as to guarantee full recognition of such programme on behalf of the responsible academic body. The name and email of the Responsible person must be filled in only in case it differs from that of the Contact person mentioned at the top of the document. |
| Reasons for deleting a component | <ol style="list-style-type: none"> 1. Previously selected educational component is not available at the Receiving Institution 2. Component is in a different language than previously specified in the course catalogue 3. Timetable conflict 4. Other (please specify) |
| Reason for adding a component | <ol style="list-style-type: none"> 5. Substituting a deleted component 6. Extending the mobility period 7. Adding a virtual component 8. Other (please specify) |



Integrative Chemistry and Innovation Master degree

Course syllabus - M1 level

2021-2022

| SEMESTER 1 | ECTS |
|---|-------------|
| | |
| Basic science courses | |
| Introductory Mathematics and Physics | 3 |
| Molecular Design and Synthetic Tools - Basic | 3 |
| Analytical and Physical Chemistry - Basics | 3 |
| Theoretical Chemistry and Modelling Basics | 3 |
| Smart Materials Chemistry - Basics | 3 |
| | |
| Advanced science courses | |
| <i>Select 3 courses in the list below:</i> | |
| Molecular Design and Synthetic Tools - Advanced | 3 |
| Analytical and Physical Chemistry - Advanced | 3 |
| Theoretical Chemistry and Modelling - Advanced | 3 |
| Smart Materials Chemistry - Advanced | 3 |
| | |
| Innovation and Soft Skills | |
| Innovative Transdisciplinary Project | 2 |
| Design Thinking | 2 |
| i-teams workshops | 1 |
| Language | 1 |
| | |
| SEMESTER 2 | |
| | |
| Super advanced chemistry courses | |
| <i>Select 3 courses in the list below:</i> | |
| Chemical Biology | 3 |
| Advanced theoretical and computational chemistry | 3 |
| Electronic Properties of Solids | 3 |
| Soft matter and Development | 3 |
| Inorganic Materials (includes Inorganic assemblies + Chemistry for Functional Materials) | 3 |
| Bio-analytical Chemistry | 3 |
| Physical Chemistry for Bio-systems (includes Bio-interfaces + Colloids and Biomolecules) | 3 |
| Organometallic Chemistry (includes Bioinorganic Chemistry + Heteroelements and Applied Catalysis) | 3 |
| | |
| Innovation and Soft Skills | |
| Design Thinking | 2 |
| i-teams workshops | 1 |
| Language | 3 |
| | |
| Internship and seminars | |
| Pre-internship Project and Seminars | 3 |
| Laboratory Internship | 12 |

SEMESTER 1

Basic science courses

| | | | |
|---|-----------|--|---|
| C&I M1 | S1 | Course Title: Introductory Mathematics and Physics <i>Keywords: linear algebra, Hamiltonian, group theory, crystallography, applied statistics</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | | Name(s) and e-mails : F. Labat (frederic.labat@chimieparistech.psl.eu), L. Binet (laurent.binet@chimieparistech.psl.eu), P. Loiseau (pascal.loiseau@chimieparistech.psl.eu), J. Vial (Jerome.Vial@espci.fr) | |
| <i>ECTS : 3</i> | | <i>Total hours : 30 h</i> | <i>rating: final exam: written (100%)</i> |
| <p>Description</p> <p>This module introduces the main concepts in mathematics and physics useful to follow the Chemistry & Innovation track of the Graduate Program in Chemistry.</p> <p>The training is based on three main courses: applied statistics (9h), mathematics (6h) and physics (15h), which are each presented with illustrating examples and exercises in class.</p> <p>The main concepts covered are: applied statistics, linear algebra, Hamiltonian and Fourier transform, along with quantum physics, group theory, symmetry, crystallography and diffraction.</p> | | | |
| <p>Learning goals</p> <p>The student should be able to:</p> <ul style="list-style-type: none"> - understand the notions of random variable, distribution, estimation, hypothesis formulation and testing - know the basic concepts of quantum physics and chemistry, such as linear algebra, Hamiltonian, eigenspace, hermiticity and Fourier transform - understand the main concepts of quantum physics, group theory, symmetry, crystallography and diffraction, along with their connections. | | | |
| <p>Pre-requisites</p> <p>None</p> | | | |

| | | | |
|---|-------------------|--|--|
| C&I M1 | S1 | Course Title: Molecular Design and Synthetic Tools - Basics Synthetic Molecular Chemistry and Biochemistry <i>Keywords: C-C bond formation, asymmetric synthesis, rearrangements, pericyclic reactions, organometallic catalysis, coordination chemistry, biochemistry</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | | Guillaume Lefèvre (guillaume.lefevre@chimieparistech.psl.eu) Yann Verdier (yann.verdier@espci.psl.eu) | |
| ECTS : 3 | Total hours : 24h | rating: final written exam | |
| <p>Description</p> <p>This course will be divided into 3 units:</p> <p>a) Basics in organic chemistry</p> <p><i>Contents:</i> 4 courses. (i) classical synthetic tools for C-C bond formations, reactivity of usual functional groups (carbonyls, iminiums, enamines, Mannich reaction and related transformations, Evans aldol reaction); (ii) asymmetric / diastereoselective synthesis involving main-group reagents; (iii) rearrangements and transpositions; (iv) pericyclic reactions.</p> <p>b) Basics in organometallic chemistry</p> <p><i>Contents:</i> elementary steps in organometallic chemistry, reactivity of transition-metal complexes, electron counting in complexes, usual C-C bond formation or C=C hydrogenation catalytic cycles (hydrogenation, metathesis, cross-coupling, extension to industrial synthesis of fine chemicals (e.g.: L-DOPA) or to high-scale processes (eg: acetic acid in Cativa / Monsanto processes)).</p> <p>c) Basics in biochemistry</p> <p><i>Contents:</i> the chemistry of life; 50 molecules to know: Nucleic acid, Amino acids and proteins, Carbohydrates & Lipids; DNA and the genetic code; RNA synthesis, Protein synthesis ; Enzymes.</p> | | | |
| <p>Learning goals</p> <p>The student should be able to:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Give the mechanism of multistep transformations of complex targets involving carbonyls as well as carboxylic acids and derivatives, interpret the diastereoselectivity of transformations based on simple models, give the mechanism of multistep rearrangements and various pericyclic reactions, demonstrate that pericyclic reactions are allowed using adequate selection rules. - Give a catalytic cycle for simple transformations in organometallic catalysis, and analyze the evolution of the oxidation state / electron number of the intermediates involved, as well as interpret the electronic effect of several ligands on the catalytic efficiency in some simple cases. - Describe the structure and function of the major classes of biomolecules. - Explain the mechanisms of DNA, RNA and protein synthesis and regulation. | | | |
| <p>Pre-requisites</p> <p>Good knowledge of reactivity of classic functional groups. No pre-requisite for the organometallic and biochemistry courses.</p> | | | |

| | | | |
|--|--|---|--|
| C&I M1 | S1 | Course Title: Analytical and Physical Chemistry – Basics <i>Keywords: solution chemistry ; physical chemistry and interfaces, separation sciences, electrochemistry, molecular spectroscopy</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | Name(s) and e-mails Fethi Bedioui (fethi.bedioui@chimieparistech.psl.eu), Jean-François Hochepped, Fanny d'Orlyé, Fabien Ferrage | | |
| ECTS : 3 | Total hours : 24 | <i>rating: final written exam (75%), intermediate reports (25%)</i> | |
| <p>Description</p> <p><i>The course is aimed at arming the student with fundamental concepts in solution thermodynamics and molecular spectroscopies enabling to understand and address experimental questions on how to characterize, analyze, separate molecular components in solutions or complex mixtures</i></p> <p>(i) Solution chemistry: Brønsted & Lewis acids & bases; complexation; solubility & precipitation</p> <p>(ii) Physical chemistry and interface: (a) focus on gases, ionic solutions and binary mixtures, emphasizing the notion of ideality and non-ideality and use of valid models for real behaviours (Van der Waals, Debye-Huckel models, regular solutions for example); (b) basics laws such as Laplace, Jurin, Kelvin, Young, Gibbs will be presented to describe the presence of bubbles, droplets, surfactants etc.... Finally, the Gibbs adsorption model will be introduced focusing on surfactant effect</p> <p>(iii) Separation Sciences: basic principles of mechanical separation processes (such as sedimentation, decantation, centrifugation, membrane processes ...) and diffusion separation processes (such as extraction, crystallization, chromatography ...) and introducing the notions of sample pretreatment and multi-step analysis for the development of analytical strategies</p> <p>(iv) Electrochemistry: fundamental principles of electrochemistry, in particular microelectrolysis and the current-potential characteristics $i=f(E)$ to elaborate a basis for the approach in analysis. An overview of the effect of the size of the electrode and the chemical medium on $i=f(E)$ curves will also presented</p> <p>(v) Molecular spectroscopy: NMR: structure of NMR 1D spectra (energy levels. time-independent Schrödinger equation; angular momentum operators; nuclear spin Hamiltonian; energy levels and transition energies for a system of two coupled spins; principles of a 1D NMR experiment (the vector model. Nuclear Magnetization, Bloch Equations; radiofrequency pulses; Fourier transform). <u>Optical spectroscopies:</u> basics of absorption and emission, effects of structure and environment, lifetime of excited electronic states; quantum yield and non-radiative transitions; inhibition of fluorescence</p> | | | |
| <p>Learning goals</p> <p>The student should be able to:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Predict acid-base, complexation or precipitation reactions in a system knowing its composition, -Take into account non-ideality to describe the properties of mixtures (either in gas, solution, binary mixtures,..) and adapt the laws of thermodynamics to systems where the interface plays a predominant role, - understand the fundamental aspects of electrochemistry, how to integrate the effect of the chemical medium (acidity, complexation, precipitation) and the size and shape of the electrode in the establishment and plot of $i = f(E)$ curves, - know the principal forces and interactions that control the performances of each separation method and evaluate these methods in terms of recovery rate, separation selectivity, concentration factor, - Understand the physical principles of NMR and optical spectroscopies. - Understand how a simple NMR experiment is performed. - Describe the structure of these simple spectra. | | | |
| <p>Pre-requisites</p> <p>Basics in thermochemistry, inorganic chemistry, organic chemistry, redox chemistry. Mathematical basics applied to thermodynamics (integration, derivatives, exact total differentials, cross derivatives, differential equations) Basics of quantum physics and chemistry (Schrödinger equation, energy levels). Descriptive 1D spectroscopy (1D proton NMR, absorption spectra in optical spectroscopies).</p> | | | |

| | | | |
|---|--|--|--|
| C&I M1 | S1 | Course Title: Theoretical Chemistry and Modelling – Basics Fundamentals of Theoretical Chemistry <i>Keywords: electronic structure, statistical mechanics, quantum chemistry, thermodynamics</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | Name(s) and e-mails Ilaria Ciofini, François-Xavier Coudert | | |
| ECTS : 3 | Total hours : 24 | rating: final written exam (67%), intermediate reports (33%) | |
| Description | | | |
| <i>Part 1: Basic Electronic Structure Theory</i> | | | |
| <p>The knowledge of the electronic structure of molecules and extended systems allows for the understanding of their reactivity and properties. Here we will provide a general introduction to the methods and concepts encountered when aiming at describing the electronic structure of single to multi electronic atoms and molecules.</p> <p>After the introduction of Schrödinger equation and of the common approximations applied to solve it, we will be detailed the Hartree Fock method and define the concept of electronic correlation. Examples on how reactivity can be linked to frontier orbitals analysis will also be given in the case of molecular systems.</p> | | | |
| <i>Part 2 : Fundamentals of Statistical Mechanics</i> | | | |
| <p>Statistical mechanics is one of the pillars of modern physics, linking the laws of physics at the microscopic scale, at the quantum (Schrödinger's equation) or classical level (Newton's laws), with the properties of matter and its macroscopic behavior (the laws of thermodynamics). We introduce the fundamentals of statistical mechanics, and introduce the concepts of temperature, work, heat, and entropy, the postulates of statistical mechanics, the notion of statistical ensembles and their use in the calculation of average quantities. We will cover simple models that are widely found throughout physics and chemistry: harmonic oscillator, ideal and nonideal gases, phase transitions, mean field approximations.</p> | | | |
| Learning goals | | | |
| <p>The student should be able to:</p> <ul style="list-style-type: none"> - understand the meaning of the Schrödinger equation - know the common approximations used to solve Schrödinger - describe a multi-electronic atomic or molecular system using the Hartree-Fock method - define the concept of electron correlation - rationalize the reactivity of a molecular system on the basis of frontier orbitals analysis - know the difference between classical and quantum models - calculate the partition function of a given system - determine the thermodynamic properties from the partition functions - apply a mean field approximation - use equations of state and phase diagrams | | | |
| Pre-requisites | | | |
| BSc level in physical chemistry, quantum chemistry, thermodynamics | | | |

| | | | |
|---|-----------|---|---|
| C&I M1 | S1 | Course Title: Smart Materials Chemistry – Basics Introduction to inorganic and soft materials <i>Keywords: Inorganic and soft matter, hybrids materials, synthesis and characterization</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | | Bruno Viana (bruno.viana@chimieparistech.psl.eu) 12h, Michel Cloitre (michel.cloitre@espci.fr) 12h | |
| ECTS : 3 | | Total hours : 24h | rating: final exam (written), intermediate exams, assignments, reports |
| <p>Description</p> <p>This course aims at giving the rules of construction of all inorganic, organic and hybrid systems but also to show their richness and their applications in current problems (such as energy, environment, photonics, nanotechnologies ...).</p> <p>The first part will be an “Introduction to Inorganic Materials” presenting at first basics of the solidification, including symmetry properties, intrinsic and extrinsic defects in solids, thermodynamics stability. Focus materials will be ionic solids, ionocovalent and ionometallic solids. Basic concepts on the electronic band structures and structure-properties relationships will be envisioned. We will present the fundamental aspects in the synthesis of inorganic materials, including phase diagrams, concepts of growth of inorganic materials from nanocrystals to large size materials and their characterization methods.</p> <p>Nanoparticles synthesis and functionalization will be presented. Materials synthesis using “Chimie douce”, i.e. synthesis in solution at relatively low temperature of oxides (sol gel chemistry), organic-inorganic hybrids, molecular compounds, as well as carbon-based solids (graphene...) will be introduced.</p> <p>Soft Matter encompasses very different materials that share in common weak cohesive forces and a great sensitivity to the environment: polymers, colloids, surfactants, liquid crystals. Behind this apparent diversity, they exhibit common features that can be understood in terms of unifying concepts borrowed from thermodynamic and statistical physics: entropy, enthalpy, phase separation, molecular forces.</p> <p>The course “Introduction to Soft Matter” will provide the student with a global approach connecting molecular design, synthetic chemistry, mesoscopic and macroscopic structure, material properties, and applications. Selected topics will include an introduction to polymers in bulk and solutions, colloids, and self-assembled systems made of block copolymers, surfactants, and liquid crystals. We will show how transport, flow, mechanical, and optical properties are exploited in advanced functional materials and processes.</p> | | | |
| <p>Learning goals</p> <p>At the end of this course, the student will be able to acquire the following knowledge and skills:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Appropriate the description of the main structural types characterizing solids. - Be able to distinguish the different types of defects in a solid and be aware of the mechanism of the formation of defects in a solids and the remarkable properties associated with these defects. - Understood the different existing synthesis routes for the development of inorganic materials. Can assess the pros and cons of these pathways. - Mobilize a multidisciplinary background in chemistry and physics to rationalize important material behaviors in Soft Matter (i.e. solubility versus phase separation). - Connect macroscopic behavior to microscopic phenomena (competition between entropy and enthalpy as a driven force for self-assembly) - Draw analogies between different soft materials. - Be ready to tackle more complex problems like the design of materials with tailored properties | | | |
| <p>Pre-requisites</p> <p>Thermodynamics, Chemical bonding, Group theory,</p> | | | |

SEMESTER 1

Advanced science courses

| | | | |
|--|-----------|--|----------------------------|
| C&I M1 | S1 | Course Title: Molecular Design and Synthetic Tools – Advanced Synthetic tools for health sciences <i>Keywords: Retrosynthesis, Total Synthesis, Atom- and Step-Economy, transition-metal catalysis, mechanisms, ligand effects, non-noble metals</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | | Kevin Cariou (kevin.cariou@chimieparistech.psl.eu), Guillaume Lefèvre (guillaume.lefevre@chimieparistech.psl.eu) | |
| ECTS | | Total hours: 24h | rating: final written exam |
| <p>Description</p> <p>This course advanced course is divided into two units:</p> <p>a) Retrosynthetic analysis and total synthesis of bioactive compounds (12 h, K. Cariou) This course will introduce the principles of retrosynthetic analysis and their applications for the design of synthetic routes. Recent examples of syntheses of bioactive molecules (whether natural products or manufactured drugs) will serve as illustrations and a particular emphasis will be placed on atom- and step-economic synthetic strategies. The course will be divided between classes and practical exercises that will take the form of team projects.</p> <p>b) Advanced organometallic chemistry (12 h, G. Lefèvre) This course follows the “basics in organometallic chemistry” course. Classic transition-metal-catalyzed processes (in particular cross-coupling, C-H activation, formation of C-C bonds involving radicals) will be discussed from a mechanistic standpoint (kinetics data, role of the ligand in the promotion of the elementary steps of the catalytic cycle). An overview of the state-of-the art in non-noble metal catalysis (e.g. with 3rd-row metal catalysts) will also be given.</p> | | | |
| <p>Learning goals</p> <p>The student should be able to:</p> <ul style="list-style-type: none"> - do the retrosynthetic analysis of a given molecule - propose the key synthetic steps - devise an efficient synthetic strategy - solve a synthetic problem through teamwork - extract the key data from a scientific publication - rationalize the choice of a catalytic system (ligand, metal, conditions) for a given goal - suggest a plausible catalytic cycle taking into account of experimental data | | | |

| | | | |
|---|--|---|--|
| C&I M1 | S1 | Course Title: Analytical and Physical Chemistry – Advanced Physical chemistry of detection, probing and imaging <i>Keywords: sample treatment, separation, detection, trace or even ultra-trace analysis, process miniaturization, mesoscale and supramolecular characterizations and imaging</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | Name(s) and e-mails Laure Trapiella (laura.trapiella@chimieparistech.psl.eu), Fethi Bedioui, Christophe Tribet, Fanny d'Orlyé, Anne Varenne, Bich-Thuy Doan | | |
| ECTS : 3 | Total hours : 24h | rating: rating: final written exam (67%), intermediate reports (33%) | |
| <p>Description</p> <p><i>This course has two parts and it is aimed at presenting a journey of discovery of up-to-date techniques and design of molecular probes used to investigate molecular compositions of samples, and/or spatial organization and dynamics of molecules or assemblies. The objective is to become familiar with most common analytical methods, types of spectroscopy, and imaging practices. To complement fundamental presentations of the methods, a hands-on understanding will be provided by visiting experts in their laboratories.</i></p> <p>(i) Analytical physico-chemistry for environmental analysis: the course will focus on detection techniques (i.e. spectroscopic, electrochemical) capable to reach very low detection limits of pollutants and the need for the development of portable, rapid, reliable and in-situ analysis, thus the need of the miniaturization, will be presented (Laura Trapiella; 6h)</p> <p>(ii) Analytical physico-chemistry for biotechnology and clinical diagnostics: notion of biomarkers and sample matrix effects will be presented. Then the different kinds of biorecognition events and associated bioassay formats will be introduced. Also considering the whole analytical process the main processes on sample treatment, separation techniques and coupling with performant detection methods (i.e. spectroscopic and electrochemical) will be illustrated. Finally, the concept of method/test validation will be afforded in the view of the development of new analytical strategies that can arrive to the end-users (Laura Trapiella; 6h).</p> <p>(iii) Radiation-based analysis, from spectroscopy to imaging (part I): basics of the chemical probes and probing methods at the molecular level will be presented in MRI, EPR, optical mono (IR, UV-Vis)/bi-photon fluorescence to characterize the structure and understand the properties of probes. Advanced applications in cellular diagnosis or for novel therapies will be detailed (including photoactivable biomolecules, NIR probes for image guided therapy, biphotonic and super resolution techniques) (Bich Thuy Doan; 6h).</p> <p>(iv) Radiation-based analysis, from spectroscopy to imaging (part II): The course will cover a range of optical and scattering-based methods, used to characterize structures at the nanometer to micrometer length scales. The theory of scattering (light, small angle X-ray) will be established. Models of scattering patterns will be presented to determine molecular weight, radii, shape, and impact of inter-molecular attraction/repulsion forces involved in molecular assemblies, macromolecules, colloids, up to spatial organization of biological matter. (Christophe Tribet; 6h).</p> | | | |
| <p>Learning goals</p> <p>The student should be able to:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Identify the steps of an analytical process, know the principal processes and techniques for the sampling, sample treatment and analytical determination - Know the more common formats and detection methods used for the environmental and biological analysis - Understand the general principle of Magnetic Resonance methods and MR imagings. - Understand optical methods for mesostructure characterization (microscopies, elastic static scattering, tracking) | | | |
| <p>Pre-requisites</p> <p>Basics in atoms and molecules energy levels, molecules interactions, complexation, magnetic resonance and optical spectroscopy. Basics in physical and analytical chemistry, chemistry of solutions & molecular interactions. Basics in optics and interferences</p> | | | |

| | | | |
|---|---|---|--|
| C&I M1 | S1 | Course Title: Theoretical Chemistry and Modelling – Advanced Modelling and simulation in chemistry <i>Keywords:</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | Name(s) and e-mails: Carlo Adamo (carlo.adamo@chimieparistech.psl.eu), Frédéric Labat (frederic.labat@chimieparistech.psl.eu), Damien Laage (damien.laage@ens.psl.eu) | | |
| ECTS : 3 | Total hours : 24h | <i>rating: final written exam (67%), intermediate reports (33%)</i> | |
| <p>Description</p> <p>Advanced electronic structure methods enabling the treatment of electron correlation will be introduced focusing on Density Functional Theory. The coupling and extension of ab-initio approaches to describe condensed phases (solution, solids, interfaces and surfaces) will be detailed. Multi-layer methods combining Quantum and Classical approaches will be introduced for the simulation of complex environments.</p> <p>Example of academic and industrial applications of these QM and mixed QM/MM methods to model i) chemical reactivity and catalysis (homogenous and heterogeneous) and ii) macroscopic properties of materials for energy production and storage and iii) biomolecules will be provided.</p> <p>Based on the concepts of statistical physics and thermodynamics, molecular simulation has developed as a way to obtain information about the physical and chemical properties of a given complex system. We will introduce the students to the main classes of molecular modelling methods, molecular dynamics and Monte Carlo simulations. We will learn to study reactivity in condensed phases, both from the theoretical and computational points of view. We will contrast the approaches of quantum chemical and classical methods, and provide an introduction into mesoscale modeling methods, such as lattice-based simulations and kinetic Monte Carlo.</p> <p>The course will use examples from a wide variety of fields, and demonstration applications of the methods and theories in the areas of chemistry in the liquid phase, at interfaces, for materials, and biological systems.</p> | | | |
| <p>Learning goals</p> <p>The student should be able to:</p> <ul style="list-style-type: none"> - understand the fundamentals of Density Functional Theory - understand how one can simulate periodic systems - understand the fundamentals of molecular simulation in chemistry, and their ties to statistical mechanics - know differences between molecular simulation techniques - choose an appropriate simulation technique for a given complex question - read a computational chemistry article and understand the methodology and its limitations | | | |
| <p>Pre-requisites</p> <p>BSc level in statistical physics, quantum chemistry, physical chemistry</p> | | | |

| | | | |
|---|-----------|--|--|
| C&I M1 | S1 | Course Title: Smart Materials Chemistry – Advanced Materials design and properties <i>Keywords:</i> Advanced functional materials. Hybrid materials. Energy storage and conversion. Batteries. Optical Materials. Metal Organic Frameworks, Stimuli-responsive materials | |
| Instructor(s), Coordinator | | A. Tissot 6h (antoine.tissot@ens.psl.eu), A. Grimaud 6h (alexis.grimaud@college-de-france.fr), B. Viana 6h (bruno.viana@chimieparistech.psl.eu), Y. Tran 6h (yvette.tran@espci.fr) | |
| ECTS : 3 | | Total hours : 24h | rating: final exam (written), intermediate exams, assignments, reports |
| <p>Description</p> <p>This course will provide at first the necessary skills to design smart materials. The focus will be: how to start from these concepts to develop smart materials. The relevant applications of the advanced functional materials will be described as well as their fate and recycling issues.</p> <ul style="list-style-type: none"> - Description of basic concepts of coordination chemistry including geometry/reactivity/stability of coordination complexes. - Ligand field theory, electronic properties of solids. - Electronic transitions in rare-earths and transition metal doped materials. - Diffusion properties in solids and quick recapitulative about electrochemistry and its application to solids and solid/liquid interfaces. - Triggering of a stimulus such as temperature, pH, salt, light, electric and magnetic fields. - Inducing changes of molecular conformation (surfactants, polymers) and/or changes of assembling (gels, colloids, emulsions). - Control of macroscopic properties (rheological, mechanical, interfacial as wetting, adhesion, friction). <p><u>Toward applications</u></p> <p>=> Synthesis, properties and applications of crystalline porous solids (Metal-Organic Frameworks). => New developments of batteries: which battery/chemistry for which application? Current research trends in battery performances and chemistry: tradeoff between energy/power density and scalability. Recycling issues => Materials for lasers, scintillation, photovoltaics and imaging => Materials and biotechnologies (encapsulation, microfluidics, injectable gels, photonic crystals...)</p> <p>Furthermore, materials sustainability will be envisioned: can smart materials be sustainable and what are the bottlenecks to tackle?</p> | | | |
| <p>Learning goals</p> <p>At the end of this course, the student will be able to acquire the following knowledge and skills in the various fields:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Structure and reactivity of coordination compounds - Description of the properties of porous solids - Photon, electron and phonon properties relationships. Radiative and non-radiative relaxations. - Color and luminescence - Redox properties of solids and alkali-cation diffusion properties in solids - Charge transfer at solid/liquid interface - Concept of stimuli-responsiveness - To pilot molecular changes for microscopic/mesoscopic/macroscopic changes | | | |
| <p>Pre-requisites</p> <p>Basics of inorganic and organic chemistry, coordination chemistry. Basics of soft matter. Thermodynamics. Basics courses of the Graduate Program.</p> | | | |

SEMESTER 1

Innovation and soft skills

| | | | |
|--|--|--|--|
| C&I M1 | S1 | Course Title: Innovative Transdisciplinary Project <i>Keywords: innovation, scientific project</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | Name(s) and e-mails : Fethi Bedioui (fethi.bedioui@chimieparistech psl.eu), Guillaume Lefèvre (guillaume.lefevre@chimieparistech psl.eu) | | |
| <i>ECTS : 3</i> | <i>Total hours : 54h</i> | <i>rating: final report and oral presentation</i> | |
| Description The students must design a scientific and innovative project based on research topics developed in PSL laboratories in order to gain awareness of the transformation of research results into innovative applications. Their projects will be carried out in strong interaction with these laboratories. | | | |
| Learning goals The student will become familiar with project design and planning, group work and multi-partner interaction. | | | |
| Pre-requisites none | | | |

Entrepreneurship and Soft Skills

| | | | |
|--|-----------|--|---|
| C&I M1 | S1 | Course Title: Design Thinking <i>Keywords: design, innovation</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | | Name(s) and e-mails: Faustine Vanhulle, Damien Ziakovic, Marc Dolger, Corinne Soulié, Hélène Montès | |
| ECTS : 2 | | Total hours : 35h | rating: written exam (30%), intermediate assessments (35%), oral presentation (35%) |
| Description | | | |
| <p>This course aims at showing how to imagine a material / innovate for a specific object by interacting with other actors such as designer, marketing manager, etc...</p> <p>In this course, the "Design Thinking" approach is presented and applied to a real innovation issue. In 2019, the theme was "personalised care" proposed by LVMH Research.</p> <p>The course is articulated between courses and workshops given by innovation advisors, designers and scientific researchers. It takes place over one quarter, with a dedicated week in November and a few isolated sessions of 2 or 3 hours upstream and downstream.</p> <p>The initial problem is first analysed (example of the existing situation, surveys, tests) and then repositioned in an innovative approach (responding to a real identified need). The analysis and repositioning methods are based on ideation sessions, the preparation of a trend book, tests and surveys.</p> <p>Intermediary presentation sessions allow to iterate the process, to refine the positioning, to define the technical feasibility and the business model and to check the sustainability of the proposed solution.</p> <p>The solutions selected for their innovative potential are developed during a dedicated week at the end of January, preceded by a presentation session at the beginning of January.</p> | | | |
| Learning goals | | | |
| <ul style="list-style-type: none"> - identify innovation in a specific field (do not confuse innovation and invention...) - mobilize design thinking tools to generate innovative ideas, test them, etc. - mobilise the designer's tools to position his ideas in relation to the existing market (trend book) - confronting one's ideas with existing or implementable technical feasibility - take into account the development of its ideas (marketing, target audiences, sustainability by industry) | | | |
| Pre-requisites | | | |
| none | | | |

| | | | |
|--|-----------|---|--------------------|
| C&I M1 | S1 | Course Title: PSL I-teams workshops <i>Keywords: innovation, entrepreneurship</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | | Name(s) and e-mails : Nadine-Eva Jeanne (nadine-eva.jeanne@psl.eu), Karla Balaa (karla.balaa@psl.eu) | |
| ECTS : 1 | | Total hours : 16h | rating: validation |
| Description | | | |
| <p>This course aims at developing entrepreneurship skills and exposing to the challenges of innovation. It will provide students with hands-on introduction to the valorisation of research results and the creation of companies.</p> | | | |
| Learning goals | | | |
| <p>The student will become familiar with idea conceptualization, go-to-market strategy, market study, project development, management, law and financial aspect of companies.</p> | | | |
| Pre-requisites | | | |
| none | | | |

| | | | |
|--|-----------|--|---|
| C&I M1 | S1 | Course Title: Language <i>Keywords:</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | | Name(s) and e-mails : Daria Moreau (daria.moreau@chimieparistech.psl.eu) | |
| <i>ECTS : 1</i> | | <i>Total hours :</i> | <i>rating: intermediate assessments</i> |
| Description Students are offered courses in various languages (French for foreigners, English,...) | | | |
| Learning goals Develop student's proficiency in foreign language | | | |
| Pre-requisites none | | | |

SEMESTER 2
SUPER-ADVANCED CHEMISTRY COURSES

Chemical Biology

| | | | |
|---|-----------|--|----------------------------|
| C&I M1 | S2 | Course Title: Chemical Biology <i>Keywords: Nucleic acids, Modified-Nucleic acids, Synthesis, Biochemistry, Chemical Biology Applications, peptide, protein, solid phase synthesis, biotechnology, fluorescence spectroscopy, fluorophores, fluorescence imaging; biomolecules</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | | Name(s) and e-mails Daniela Verga (daniela.verga@curie.fr), Nicolas Delsuc (nicolas.delsuc@ens.psl.eu), Anton Granzhan (anton.granzhan@curie.fr), Blaise Dumat (blaise.dumat@ens.psl.eu) | |
| ECTS : 3 | | Total hours : 24h | rating: final written exam |
| <p>Description</p> <p><i>1) Chemical Biology of modified –Nucleotides and –Nucleic Acids (6h, D. Verga)</i> In this section, we will focused our attention on the methods for obtaining modified and native nucleic acids and their biological applications. Several specific topics will be faced during the class:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Chemical synthesis of modified nucleosides, nucleotides, and oligonucleotides concerning both DNA and RNA; - Expansion of the genetic alphabet in nucleic acids by creating new synthetic nucleobases and as a consequence new base-pairs; - The concept of chemical biology applied to DNA replication, by probing DNA polymerase selectivity mechanisms with modified nucleic-acid-template chemistry; - The interactions of small synthetic molecules with DNA and effects produced on biological processes, and more specifically on replication and transcription; - At last, DNA methylation as epigenetic mechanism involving the transfer of methyl groups on DNA nucleobases and effects produced on gene expression. <p>-</p> <p><i>2) Peptides and Proteins synthesis, application to peptide biological activity (8h, N. Delsuc)</i> This section aims at giving an overview of the different approaches used to synthesize peptides and proteins. This will include chemical synthesis in solution and on solid support and chemical reactions to perform ligation enabling the synthesis of long sequences. The chemical part will include the reactions required to form efficiently amide bonds while preserving the enantio-purity of amino acids as well as protecting group management. The course will also deal with the synthesis of proteins using new biotechnological tools involving bacteria as well as procedures to ensure an appropriate folding of the proteins. In particular, the controlled formation of disulfide bridges will be discussed. Several examples of biological active peptides and proteins already on the market will be shown to illustrate these strategies.</p> <p><i>3) Molecular design strategies for fluorescent probes (12h, A. Granzhan, B. Dumat)</i> Due to its versatility, ease of implementation and high spatial and temporal resolution, fluorescence has become a ubiquitous tool in chemical biology to monitor biological processes <i>in vitro</i> or <i>in vivo</i>. Fluorescent reporters, or probes, can be used for very diverse applications, ranging from <i>in vitro</i> analytical applications to <i>in vivo</i> imaging, which call for very different requirements in terms of photophysical and biochemical properties. The goal of his course is to present the different molecular design strategies currently used to elaborate and tailor fluorescent probes for various applications. After a presentation of the underlying phenomenon of molecular fluorescence, we will cover different classes of fluorophores (from the classically used ones to the newest additions to the field), photophysical principles governing the operation of different types of fluorescent reporters, and consider various examples of the probes used for the detection, labeling and imaging of biomolecules (such as nucleic acids, proteins, enzymes...) and biologically relevant analytes (metal ions, anions, reactive species, etc.).</p> | | | |
| <p>Learning goals</p> <p>The student should be able to:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Present the synthetic pathways employed for the preparation of both modified and native nucleic acid; - Describe the applications of modified nucleotides and oligonucleotides - Describe the synthesis of new synthetic nucleobases and their biological applications; - Explain the mechanisms that allow specific DNA polymerases to incorporate modified-nucleotides and recognized modified DNA templates; - Mention the structural characteristics allowing small molecules to interact with specific DNA structures and explain the exploitation of such interactions; - Explain the natural DNA modifications why they occur and explain their effects in gene expressions. | | | |

- Master the different steps of the chemical synthesis of peptides and proteins and the requirements to produce enantiopure peptides and the different steps to produce recombinant proteins using bacteria
- Propose strategies to synthesize proteins
- Understand the principles of molecular fluorescence
- Know various applications of fluorescence in chemistry and biology such as structural or analyte sensing, imaging
- Know the most widely used classes of fluorophores and their characteristics, be able to identify the fluorescent scaffolds;
- Understand the photophysical and supramolecular principles governing the operation of fluorescent probes and requirements for a given application
- Tailor a fluorescent probe for a given application by combining the proper fluorescent scaffold with the adequate functional groups while taking into account the synthetic feasibility

Pre-requisites

Knowledge in organic chemistry and basic knowledge in biochemistry, organic synthesis: (orthogonal reactions, protecting groups), basics in cellular biology (protein expression), heterocyclic chemistry, physical chemistry

Advanced theoretical and computational chemistry

| | | | |
|---|---|---|--|
| C&I M1 | S2 | Course Title: Advanced theoretical and computational chemistry <i>Keywords:</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | Name(s) and e-mails Ilaria Ciofini (ilaria.ciofini@chimieparistech.psl.eu); François-Xavier Coudert (fx.coudert@chimieparistech.psl.eu) | | |
| ECTS : 3 | Total hours : 24h | rating: final written exam (67%), intermediate reports (33%) | |
| Description The course will provide an advanced perspective both on theoretical models and simulation techniques treating several among the topics detailed below. Regarding numerical simulations, building on the introduction given in the advanced class, this course will address a range of modern techniques, including first-principle methods, extended statistical ensembles, description of nuclear quantum effects via path-integral simulations, multi-scale strategies, and the combination with machine learning approaches. Various applications of these techniques to condensed phase chemistry will be studied. This course will also present advanced theoretical models to describe chemical reactivity; starting from Transition State Theory, the course will introduce the concept of friction on barrier-crossing, its formal description via stochastic approaches and will finally address the complex case of non-adiabatic chemical reactions. Concerning electronic structure methods, the course will explicitly address state of the art methods enabling the first-principle simulation of spectroscopic properties of molecules and extended systems. Perturbative and variational methods allowing to obtain accurate vibrational spectra will be introduced and compared to approaches based on dynamical approaches. Linear response –in the framework of the Time Dependent DFT approach- will be introduced and the simulation of the photophysical properties of molecular and extended (3D, 2D, 1D) systems will be discussed. The accuracy and the limit of these methods (coupled with embedding techniques and/or multi-layer approaches to simulate the environment) will be illustrated through selected examples. | | | |
| Learning goals The student should be able to: <ul style="list-style-type: none"> - understand the main concepts related to the modeling of spectroscopic properties of molecules and extended systems - list the tradeoffs involved in different molecular simulation techniques - write up a work plan for a multi-scale simulation strategy - compare experimental data, computational results, and theoretical models of reactivity - understand articles on machine learning techniques applied to chemistry | | | |
| Pre-requisites BSc level in statistical physics, quantum chemistry, physical chemistry | | | |

Electronic Properties of Solids

| | | | |
|--|-----------|---|-----------------------------------|
| C&I M1 | S2 | Course Title: Electronic Properties of Solids : from Concepts to Devices <i>Keywords: band structures, optical and electrical properties, semiconductors, devices</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | | Name(s) and e-mails: Laurent Binet, Pascal Loiseau, Frédéric Wiame Laurent Binet (laurent.binet@chimieparistech.psl.eu) | |
| <i>ECTS: 3</i> | | <i>Total hours : 22,5h</i> | <i>rating: final written exam</i> |
| <p>Description</p> <p>The aim of this course is to describe the electronic structure of solids and the main properties and applications resulting from them, with an overview of current technological developments.</p> <p>In the first part the course introduces the basic concepts and models (free electron gas, tight-binding) for the electronic band structures of solids and shows how these models explain the main classes of properties, electrical, optical and chemical of solids.</p> <p>In the second part, the course focuses on an important class of materials, semiconductors, and describes in details the phenomena that occur in a p-n junction. The applications of such junctions are described, in particular solar cells, photodiodes and light-emitting diodes.</p> | | | |
| <p>Learning goals</p> <p>The student must be able to do:</p> <ul style="list-style-type: none"> - to define the characteristics of the two main models of electronic structure of solids and to know in which context to apply them, - explain the main parameters that govern the electrical and optical properties of materials and the factors that have a positive or negative effect on these properties, - interpret a band structure diagram of a solid and deduce its electrical and optical behaviour, - describe in detail the electronic processes occurring in the main semiconductor devices and explain the factors controlling their performance - to establish a structure-property relationship for a given application. | | | |
| <p>Pre-requisites</p> <p>quantum mechanics (Hamiltonian, operators, Dirac notation, model quantum systems), electronic structure of atoms and molecules (atomic orbitals, molecular orbitals, bonding/antibonding orbital), crystallography (crystal systems, normal lattice, reciprocal lattice), general physics (classical mechanics, electrostatics, waves), maths (integrals, partial derivatives, differential, laplacian, gradient, divergence)</p> | | | |

Soft Matter and Developpement

| | | | |
|---|-----------|--|----------------------------|
| C&I M1 | S2 | Course SuperAdvanced : Soft matter and Development <i>Keywords: soft matter, polymers, liquid crystals, colloids, formulations</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | | Name(s) and e-mails: Michel Cloître (michel.cloitre@espci.fr) | |
| ECTS : 3 | | Total hours : 26h | rating: final written exam |
| <p>Description</p> <p>The Soft Matter and Development course, designed for physicists, chemists and physico-chemists, illustrates how a good knowledge of basic concepts in Soft Matter, with an interdisciplinary approach, allows you to design and develop innovative materials and processes.</p> <p>Course's content.</p> <p>1- Macromolecular engineering : polymer blends, block copolymers, microphase separation of block copolymers, thermoplastic elastomers, nanostructured materials, analogy with surfactants phases</p> <p>2- Molecular engineering : phases of liquid crystals (nematic, smectic, chiral), defects and textures, liquid crystal displays and other display devices</p> <p>3- Colloidal engineering : hard spheres suspensions, glasses and colloidal crystals, development of photonic materials, deformable colloids (emulsions, microgels, micelles...), jamming transition</p> <p>4- Formulations in solution: polymers in diluted and semi-diluted solutions, physical and chemical gels, stimuli-responsive polymers, gels and biomaterials, polyelectrolytes, associative polymers</p> <p><i>Course support:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Richard A.L. Jones, Soft Condensed Matter, Oxford University Press • Masao Doi, Soft Matter Physics, Oxford University Press | | | |
| <p>Learning goals</p> <p>The student must be able to:</p> <ul style="list-style-type: none"> - mobilize knowledge to solve a complex problem - critically analyze a scientific article - interpret experimental data and modelize them - relate macroscopic behavior to microscopic phenomena - draw analogies between different issues - use English scientific and technical vocabulary | | | |
| <p>Pre-requisites</p> <p>Basics of thermodynamic and statistical physics: entropy, enthalpy, phase separation, molecular forces. Basic knowledge of rheology. Basic knowledge of the structure of materials</p> | | | |

Inorganic Materials
includes the “Inorganic Assemblies” course and the “Synthesis of Inorganic and Hybrid Materials course” (next page)

| | | | |
|--|-----------|--|-----------------------------------|
| C&I M1 | S2 | Course Title: Inorganic assemblies <i>Keywords:</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | | Name(s) and e-mails: Philippe Barboux (philippe.barboux@chimieparistech.psl.eu) | |
| ECTS : | | <i>Total hours : 15h</i> | <i>rating: final written exam</i> |
| Description | | | |
| <p>The objective of this course is to give the rules of construction of all inorganic and mineral systems but also to show how much this inorganic chemistry is alive and has many applications in current problems (energy, environment, information storage, nanotechnologies...). An introduction to the industrial mineral chemistry industry completes the course (cements, glasses, aquatic chemistry, batteries). The theoretical part focuses on transition metal and lanthanide complexes and describes in particular their optical and magnetic properties.</p> | | | |
| Learning goals | | | |
| <p>At the end of the course,</p> <ul style="list-style-type: none"> - The student knows the periodic table and the trends of the different elements (ionization, complexation, orbital levels). - He can describe a mineral system and choose between two simple approaches to describe inorganic complexes according to two-ion binding or covalent-binding models. - He can explain the stability and reactivity of inorganic molecules based mainly on transition elements or elements of the p-block - He can have a view of the applications in various domains such as energy, environment, information storage, nanotechnologies. | | | |
| Pre-requisites | | | |
| <p>Atomistic, Chemical bonding, electronic structure of atoms and molecules (atomic orbitals, molecular orbitals, bonding/antibonding orbital, crystal field), crystallography (crystal systems, normal lattice, reciprocal lattice), general physics.</p> | | | |

| | | | |
|---|-----------|--|----------------------------|
| C&I M1 | S2 | Course Title: Synthesis of Inorganic and Hybrid Materials <i>Keywords: Inorganic materials, porous solids, synthesis, challenges</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | | Name(s) and e-mails: Sandrine Ithurria, Thomas Pons, Vanessa Pimenta, Christian Serre (sandrine.ithurria@espci.fr) | |
| ECTS : | | Total hours : 14h | rating: final written exam |
| <p>Description</p> <p>The « Chemistry for Functional Materials » course is dedicated to chemists who wish to develop a broader view on the synthesis and characterization of inorganic materials and functional hybrids.</p> <p>The course contains two (equal) parts: crystallized inorganic materials (7 hours) and crystallized porous materials (7 hours). For both classes of materials, the methods of synthesis and the challenges related to their characterization will be addressed, as well as their potential applications in various fields (health, energy, environment, optoelectronics). Few hours of tutorial will complement this course.</p> <p>Course's content.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Introduction to porous crystalline solids (zeolites, clays, LDH, MOFs, hybrid cages) 2. Methods of synthesis and modulation of porosity (exfoliation, composites...) 3. The challenges of characterizing porous networks (BET, in-situ IR, solid NMR, MET, modeling) 4. Potential applications of porous solids (environment, energy, health) 5. Outlook – scaling up, shaping and industrialization (marketing, proven applications) 6. Introduction to advanced inorganic materials 7. Methods for the synthesis of inorganic materials 8. Characterization methods 9. Applications of advanced inorganic materials <p>To deepen your knowledge: F. Schüth, K. S. W. Sing, J. Weitkamp, Handbook of Porous Solids, Wiley Print ISBN:9783527302468 Online ISBN:9783527618286 DOI:10.1002/9783527618286</p> | | | |
| <p>Learning goals</p> <p>The student must be able to:</p> <ul style="list-style-type: none"> - identify the different classes of inorganic and hybrid crystalline materials... - describe the different modes of synthesis of functional materials - relate structural characteristics to material properties - discuss the characterization methods - consider the potential applications of crystalline functional materials - analyze and identify important results of scientific publications - explain concepts and ideas in a short presentation - use English scientific and technical vocabulary | | | |
| <p>Pre-requisites</p> <p>Basics of structural and solid state chemistry Basics of coordination chemistry</p> | | | |

Bio-analytical Chemistry

| | | | |
|--|-----------|---|--|
| C&I M1 | S2 | Course Title: Bio-analytical Chemistry <i>Keywords: analytical systems, engineering, process miniaturization, innovation, engineering</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | | Name(s) and e-mails : Fanny d'Orlyé (fanny.dorlye@chimieparistech.psl.eu) | |
| ECTS : 3 | | Total hours : 24h | rating: final written exam + intermediate rating |
| <p>Description</p> <p>Developments and trends in modern analytical chemistry point in the direction of simplification, automation and miniaturization of processes while preserving the performance and reliability of the analytical results. The opportunities and challenges inherent in miniaturization at each stage of an analysis processes are very different and need to be addressed. The main objective of this course is therefore to provide a comprehensive overview of current innovations in the field of analytical systems. The final objective is the development of micro(nano)sensors and total analysis microsystems (μTAS) for the biotechnology and clinical diagnostic applications.</p> | | | |
| <p>Learning goals</p> <p>The course will focus on new analytical and bioanalytical tools for downscaling several laboratory operations (sample introduction, processing, separation, detection) in order to process extremely small volumes of fluids and also to integrate the above-mentioned processes on a device miniaturized of a few square centimetres allowing for high-speed automation and processing of analysis.</p> <p>The main competences to be acquired by the students will concern:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) new nanomaterials functionalized for diagnostics: (nanosupports, nanoparticles, nanotubes, monoliths, molecular printed materials, etc.), selective agents (antibodies/proteins, aptamers, chelating agents...) and procedures for conjugation; 2) the development of miniaturized separation methods (chromatographic or electrokinetics) mainly based on molecular recognition to purify, concentrate and isolate analytes of interest; 3) the detection in miniaturized analytical systems (optical, electrochemical, mass spectrometry); 4) The analytical processes ranging from standard bioassays to micro(nano)sensors and total analysis microsystems for biotechnology and clinical diagnostic applications. | | | |
| <p>Pre-requisites</p> <p>basic notion in solutions thermodynamics, non-covalent interactions, colloids, electrochemistry and separation methods</p> | | | |

Physical Chemistry for Bio-systems
includes the “Bio-interfaces” course and the “Colloids and biomolecules” course
(next page)

| | | | |
|---|-----------|---|-----------------------------------|
| C&I M1 | S2 | Course Title: Bio-interfaces <i>Keywords: surface, composition, reactions, techniques, biomolecules</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | | Name(s) and e-mails : Anouk Galtayries (anouk.galtayries@chimieparistech.psl.eu) | |
| <i>ECTS :</i> | | <i>Total hours : 15h</i> | <i>rating: final written exam</i> |
| Description This lecture aims at showing that the key role played by the surface of materials in the issues related to the interfaces between solids and biological environment (biointerfaces). These issues are mainly in the biomedical context but also, more widely, for any innovative systems implying surfaces and biomolecules (biosensors, biofilms in food industry, biocorrosion...). This course implies the following items: <ul style="list-style-type: none"> - Introduction: the surface = a complex material (structure, composition, model surfaces, real surfaces - Biointerfaces; where all biological processes occur - Dedicated physico-chemical characterization techniques: in situ real time ones, UHV techniques, combination of techniques morphology and composition... - Different examples of surface reactivities from amine acid reactions to protein non specific and specific interactions Interactivity on specific topics: understanding the quantitative approach | | | |
| Learning goals <ul style="list-style-type: none"> - The student will take into account the outermost layers in a material issue. - The student will know the principles, advantages and drawbacks of some characterization techniques of solid surfaces/materials - The students should be able to propose quantification and qualitative approaches when discussing a biointerface characterization strategy - The students should be able to identify the properties of biomolecules adsorption, and impact on further reactions, and to model an experiment to understand surface reaction mechanisms in the frame of biomaterials. | | | |
| Pre-requisites none | | | |

| | | | |
|---|--------------------------|--|--|
| C&I M1 | S2 | Course Title: Colloids and Biomolecules | |
| | | <i>Keywords:</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | | Name(s) and e-mails : Jérôme Bibette (jerome.bibette@espci.psl.eu) | |
| <i>ECTS :</i> | <i>Total hours : 10h</i> | <i>rating: final written exam</i> | |
| Description | | | |
| <p>The key topics addressed in this course are :</p> <ul style="list-style-type: none"> • How do collids diffuse in their environnement via brownian motion? • How do colloids and biomolecules react and associate in a complex medium? How to model ligand-receptor interactions on cell membranes? • What is the dissociation dynamics of bio-complexes and how to studt the properties of these associations? • How to apply colloidal science to medical diagnostic? | | | |
| Learning goals | | | |
| <p>The student should be able to:</p> <ul style="list-style-type: none"> - explain and predict the diffusion of colloids in a complex medium - explain and model interactions at stake between colloids and biomolecules - explain and predict the association/dissociation dynamics - relate the associations and their dynamics to the properties of the macroscopic systems - propose medical diagnostic | | | |
| Pre-requisites | | | |

Organometallic Chemistry
includes the « Bio-inorganic chemistry course” and the “Heteroelements and applied catalysis” course (next page)

| | | | |
|--|-----------|--|-----------------------------------|
| C&I M1 | S2 | Course Title: Bioinorganic chemistry <i>Keywords: bioorganometallic chemistry, enzymes, inorganic chemical biology, medicinal inorganic chemistry, metal complexes</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | | Gilles Gasser gilles.gasser@chimieparistech.psl.eu | |
| ECTS | | <i>Total hours: 15h</i> | <i>rating: final written exam</i> |
| Description <p>The vast majority of drugs used today are purely “organic” compounds – they do not contain any metal atoms. However, due to their different kinetic, geometric and electronic properties, metal complexes can undergo reactions which are not possible with organic agents. With the exception of cisplatin and its derivatives, metal-containing drugs, particularly organometallics, have been, until very recently, largely neglected by both the pharmaceutical industry and academia. Over the last few years, however, things have changed, and significantly! Indeed, “inorganic drug candidates” are beginning to enter clinical trials, with more promising lead structures in the pipeline.</p> | | | |
| Learning goals <p>This course will cover the latest advances in the field of medicinal inorganic chemistry with an emphasis on the discovery of new inorganic compounds with proven anti-cancer activity, enzyme inhibition or anti-malarial properties. Moreover, the specific mechanism of action of the metal-based drugs will be presented in detail.</p> | | | |
| Pre-requisites <p>This course requires basic knowledge of inorganic chemistry and biochemistry.</p> | | | |
| Teaching language: english Lecture notes: yes URL: | | | |

| | | | |
|--|-----------|---|----------------------------|
| C&I M1 | S2 | Course Title: Heteroelements and Applied Catalysis <i>Keywords: catalysis, transitions metals, coupling reactions, heteroelements</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | | Name(s) and e-mails : Phannarath Phansavath (phannarath.phansavath@chimieparistech.psl.eu) | |
| ECTS : | | Total hours : 12h | rating: final written exam |
| Description | | | |
| <p>The course Heteroelement Chemistry aims at introducing the various methods for preparing phosphorus, sulfur and silicon reactants. The main transformations achieved with these compounds are given with applications in total synthesis. The goal of the course Applied Catalysis is to provide with the bases of organometallic chemistry involving transition metals (palladium, rhodium and ruthenium), as a tool for the development of synthetic processes. Coupling reactions and other major applications in homogeneous catalysis are introduced with a focus not only on reaction mechanisms and but also on applications, both at industrial level and for the synthesis of natural molecules or molecules of biological interest.</p> | | | |
| Learning goals | | | |
| <p>At the end of the course, the students should be able to master the methods to perform the main transformations achieved with phosphorus, sulfur or silicon derivatives and to explain the corresponding reaction mechanisms. They should be able to use the organometallic complexes suitable for the main coupling reactions and other major reactions used in homogeneous catalysis.</p> | | | |
| Pre-requisites | | | |
| <p>Good knowledge of basic reactions in organic chemistry and good understanding of classical reaction mechanisms.</p> | | | |

SEMESTER 2

Innovation and soft skills

Entrepreneurship and Soft Skills

| | | | |
|--|-----------|--|---|
| C&I M1 | S2 | Course Title: Design Thinking <i>Keywords: design, innovation</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | | Name(s) and e-mails: Faustine Vanhulle, Damien Ziakovic, Marc Dolger, Corinne Soulié, Hélène Montès | |
| ECTS : 3 | | Total hours : 35h | rating: written exam (30%), intermediate assessments (35%), oral presentation (35%) |
| Description | | | |
| <p>This course aims at showing how to imagine a material / innovate for a specific object by interacting with other actors such as designer, marketing manager, etc...</p> <p>In this course, the "Design Thinking" approach is presented and applied to a real innovation issue. In 2019, the theme was "personalised care" proposed by LVMH Research.</p> <p>The course is articulated between courses and workshops given by innovation advisors, designers and scientific researchers. It takes place over one quarter, with a dedicated week in November and a few isolated sessions of 2 or 3 hours upstream and downstream.</p> <p>The initial problem is first analysed (example of the existing situation, surveys, tests) and then repositioned in an innovative approach (responding to a real identified need). The analysis and repositioning methods are based on ideation sessions, the preparation of a trend book, tests and surveys.</p> <p>Intermediary presentation sessions allow to iterate the process, to refine the positioning, to define the technical feasibility and the business model and to check the sustainability of the proposed solution.</p> <p>The solutions selected for their innovative potential are developed during a dedicated week at the end of January, preceded by a presentation session at the beginning of January.</p> | | | |
| Learning goals | | | |
| <ul style="list-style-type: none"> - identify innovation in a specific field (do not confuse innovation and invention...) - mobilize design thinking tools to generate innovative ideas, test them, etc. - mobilise the designer's tools to position his ideas in relation to the existing market (trend book) - confronting one's ideas with existing or implementable technical feasibility - take into account the development of its ideas (marketing, target audiences, sustainability by industry) | | | |
| Pre-requisites | | | |
| none | | | |

| | | | |
|--|-----------|---|--------------------|
| C&I M1 | S2 | Course Title: PSL I-teams workshops <i>Keywords: innovation, entrepreneurship</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | | Name(s) and e-mails : Nadine-Eva Jeanne (nadine-eva.jeanne@psl.eu), Karla Balaa (karla.balaa@psl.eu) | |
| ECTS : 1 | | Total hours : 16h | rating: validation |
| Description | | | |
| <p>This course aims at developing entrepreneurship skills and exposing to the challenges of innovation. It will provide students with hands-on introduction to the valorisation of research results and the creation of companies.</p> | | | |
| Learning goals | | | |
| <p>The student will become familiar with idea conceptualization, go-to-market strategy, market study, project development, management, law and financial aspect of companies.</p> | | | |
| Pre-requisites | | | |
| none | | | |

| | | | |
|--|-----------|--|---|
| C&I M1 | S2 | Course Title: Language <i>Keywords:</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | | Name(s) and e-mails : Daria Moreau (daria.moreau@chimieparistech.psl.eu) | |
| <i>ECTS : 3</i> | | <i>Total hours :</i> | <i>rating: intermediate assessments</i> |
| Description Students are offered courses in various languages (French for foreigners, English,...) | | | |
| Learning goals Develop student's proficiency in foreign language | | | |
| Pre-requisites none | | | |

SEMESTER 2

Internship and seminars

Internship

| | | | |
|---|----------------------|--|--|
| C&I M1 | S2 | Course Title: Pre-internship Project and Seminars | |
| | | <i>Keywords:</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | | Name(s) and e-mails : | |
| <i>ECTS : 3</i> | <i>Total hours :</i> | <i>rating: written report and oral presentation</i> | |
| Description The pre-internship project consists in a bibliographic study in connection with the internship research topic. The students should become aware of the state of the art of the topic and gain a deep understanding of the principles of the techniques to be used during the laboratory work. The seminar work consists in a short written summary of selected seminars attended during the academic year. | | | |
| Learning goals The aim of this activity is to extend the scientific knowledge of the students and to make them aware of up-to-date research topics. The student should then be able to read and understand scientific academic literature to get into an unknown topic. | | | |
| Pre-requisites none | | | |

| | | | |
|--|---------------------------------------|---|--|
| C&I M1 | S2 | Course Title: Laboratory Internship | |
| | | <i>Keywords:</i> | |
| Instructor(s), Coordinator | | Name(s) and e-mails : | |
| <i>ECTS : 15</i> | <i>Total hours : minimum 3 months</i> | <i>rating: written report and oral presentation</i> | |
| Description The internship should take place in a research laboratory either academic or in private company. | | | |
| Learning goals The student should be able to conduct a small research project, to plan and carry out experiments, to understand the theoretical bases of his/her project, to interact with other researchers and staff members, to make written and oral reports of his/her results. | | | |
| Pre-requisites none | | | |

**Syllabi of the new M2 track
Integrative Chemistry and Innovation, ICI
to open in September 2021**

Course 1: Flow chemistry

Course title: Flow chemistry, an emerging technology for organic synthesis

Pedagogical objectives: the objective of this teaching unit is to raise awareness and train students to flow chemistry for the synthesis of molecules of interests. Flow chemistry will be instrumented to decipher the fundamental reactivity and mechanisms of classical and new activation modes in organic synthesis. At the end of this course, the students will be able to:

- Understand the principles of flow chemistry: the theoretical concepts and the advantages associated with this technique versus classical batch methods
- Know the existing equipments and their utilisations
- Predict the reactivity and the reaction mechanisms of given species when submitted to various activation conditions
- Propose solutions in flow chemistry to existing problems in batch systems based on critical literature survey

Prerequisites: The student should possess a good background in organic chemistry and be aware of the classical reactivity profiles of important functional groups. He should have some basics in redox reactions and reactivity of radical species.

Course structure :

Part 1. Introduction, processes, reactors (8h)

a. General introduction (2h, **B. Laroche)**

This lecture will consist in an introduction of the technology, the description of relevant parameters and comparisons of batch vs. flow systems for organic synthesis. The different types of flow reactions will be depicted as well as the different reactors associated. This lecture will also introduce the different activation modes and chemical reactivity that will be further studied in part 2.

b. An upgrade on energy and matter transfers in continuous-flow reactors: (6h, **S. Ognier)**

At first, the influence of hydrodynamic and heat/mass transfers on reaction rate and selectivity will be illustrated by concrete examples. Then, the different physical values and associated tools enabling to characterize the chemical reactors in terms of hydrodynamic and transfer efficiency will be introduced and explained. Finally, the characteristics of different types of flow reactors (commercial or not) will be exposed as well as their utilisations.

Part 2. Flow chemistry in organic synthesis (20h)

a. Flow chemistry for organic synthesis: classical reactions and transpositions from batch to flow (2h, **C. Len).**

Examples of organic reactions: oxidation, reduction, halogenation, nitration, diazotation in batch and continuous flow processes. Integration of inline, online, atline

and offline analysis. Continuous flow production of active pharmaceutical ingredients; Continuous flow production of bio-based chemicals.

b. Flow photochemistry (4h, **B. Laroche**)

This lecture will emphasize the chemical reactions promoted by the absorption of light through the prism of flow chemistry. At first, the principles of photochemistry will be explained (absorption and emission of radiation), as well as the light irradiation effect in flow systems. This will lead to study the chemical reactivity of molecules at the excited state via direct photochemistry and photocatalysis. Finally, case studies in flow and batch systems will be analyzed.

c. Flow electrochemistry: (4h, **F. Bedioui**)

(i) basics on electrochemistry and more specifically how to integrate the characterization of redox species by electrochemistry in the implementation of quantitative electrolysis

(ii) application in continuous process: how to design electrodes and implement them in flow cells

d. Highly reactive intermediates in flow (4h, **C. Lescot**)

(i) reactions with gases as reagents, products or by-products, high pressure reactions, in-situ formation of gaseous intermediates, in continuous flow/ reactions with toxic/explosive reagents or intermediates (ii) basics of organometallic catalysis, specificities in continuous flow and advantages of heterogeneous catalysis with the different types of reactors (packed bed reactors, surface functionalization)

e. Plasmas (2h, **M. Tatoulian**)

Basics on plasma processing of materials– Plasma technology to engineer chemical reactions in microreactors

f. Other integrated technologies (4h, **C. Len**)

Ultra-sound, microwave, ball-milling and application in biomass valorization. Description of different innovative technologies and their integrations in continuous flow varying different parameters such as residence time, reactor design, source, temperature, pressure... Choice of the innovative technologies in function of the organic reactions/catalysis. Examples of organic reactions/catalysis applied to biomass and bio-based chemicals.

Part 3. Applications (10h)

a. TD 1: energy and matter transfers in flow systems (1h30, M. Zhang)

TD 2: transposition of classical reactions from batch to flow (1h30, M. Zhang)

TD 3: photoredox catalysis and applications to flow chemistry (1h30, B. Laroche)

TD 4: electrochemistry and applications to flow chemistry (1h30, F. Bedioui)

b. Presentation, visit and demonstration of flow reactions at ParisFlowTech platform (Presentation: **M. Tatoulian** (2h); demonstration: **S. Ognier** or **M. Zhang** or **R. Radjabalou** (2h)).

Part 4. Conferences (6h) *not submitted to examination*

- a. Industrial lecture: flow chemistry for pharmaceuticals (2h, **C. Mallia**, AstraZeneca, UK)
- b. Application lecture: inorganic colloidal physical chemistry under flow (2h, **A. Abou-Hassan**, SU)
- c. Academic lecture: flow photochemistry (2h, **T. Noël**, U. Amsterdam, NL)

Timing and speakers (total : 44h)

Teachers: B. Laroche (ESPCI, 7h30), S. Ognier (Chimie Paris, 6h), C. Len (Chimie Paris, 6h), F. Bedioui (Chimie Paris, 5h30), M. Zhang (Chimie Paris, 3h), C. Lescot (Chimie Paris, 4h), M. Tatoulian (Chimie Paris, 4h).

Extra: Demonstration at the platform (2h: S. Ognier or M. Zhang or R. Radjagobalou).

External speakers: C. Mallia (AstraZeneca, UK, 2h), T. Noël (U. Amsterdam, NL, 2h), A. Abou-Hassan (SU, 2h).

Assessment methods : final exam (70%) – continuous (30%)

- 1) Final exam will consist of questions and exercises related to part 1 (30 min) and part 2 (1h30) of the module.
- 2) Continuous assessment will consist in the analysis of 2 publications related to themes 2a-f (the student will choose the publications that he wants to report between the different activation methods a-f).

Course 2 : Valorization of Small molecules

Objectives

This set of courses ambitions to give the students a general overview about the state of the art and current challenges in the field of small molecules, from their capture to their catalytic transformation. The vast majority of existing courses focus either on sole gas storage or separation issues or alternatively discuss only their catalytic conversion (e.g. H₂ production, CO₂ reduction). To our knowledge, there is no master level formation that gathers both approaches. Both point of views are strongly related and complementary and most likely any major future breakthrough that will come out shall rely on such integrated approaches. In addition, instead of typically focusing on a specific catalytic transformation (e.g. electrochemical or photocatalytic, homogenous) or relying on a given class of catalysts (homogenous or heterogeneous, dense or porous materials, inorganic, hybrid or organic), a global overview of the field within pros and cons for each class of materials is proposed in order to enable students to possess a comprehensive and fair vision of this domain of major importance for the energy transition.

Teachers :

-Chimie Paris Tech : G. Lefèvre (CR CNRS)

-Collège de France : A. Grimaud (CR CNRS), C. Mellot-Draznieks (DR CNRS), M. Fontecave (PR)

-ESPCI/ENS : G. Mouchaham (CR CNRS), C. Serre (DR CNRS)

Prerequisites

Kinetics, electronic properties of solids, introduction to electrochemistry (redox reactions, Nernst potential, Tafel slopes etc.), basic organic chemistry knowledge, basics in coordination and organometallic chemistry (electronic structure of transition metal complexes, elementary steps in organometallic chemistry), basics on porous materials and their sorption properties.

Course structure :

General considerations (4h)

- CO₂ cycle (2h) GM : A general introduction about the CO₂ cycle will be given from emission to the capture, transport and utilization of CO₂, including a brief techno-economic point of view.

- H₂ production : (2h) AG : A general introduction about hydrogen will be given from production, to transport and utilization, including a techno-economic stand-point.

Basics (4h):

(i) Materials synthesis, stability: give a brief introduction for each class of materials (2h each for inorganics, MOFs, complexes/organics) AG/CS/GL

(ii) Electrocatalysis, photocatalysis (e.g. interfaces (charge transfer, separation) (2h each) AG, CM

Adsorption/separation (10h)

- Gas storage (H_2 , CH_4 ...) : a general introduction about gas storage and its related applications will be first given. One will then decipher the different mechanisms of interactions (chemisorption, physisorption) and analyse the advantages and limitations of each class of inorganic, hybrid or carbonaceous, dense or porous materials and related composites (2h) CS

- CO_2 capture (CO_2/N_2 , CO_2/CH_4) (3h) GM : following the general introduction about CO_2 capture, students will be given an overview about the different chemical and structural strategies to capture CO_2 from air (direct air capture) and flue gases (pre- and post-combustion) based on MOFs, in comparison with benchmark sorbents (zeolites, carbons, amine grafted solids). The basics on separation mechanisms will be discussed together with the existing and emerging separation processes. A particular attention will be also given to highlight the different parameters (stability, shaping, heat transfer...) that impact the performances of a sorbent during utilization.

- Other separations (3h) CS : Students will be given representative examples of utilization of MOFs for strategic separations (e.g. purification of biogas, H_2 production, C_2/C_3 , C_6 , xylene...), including a short introduction about the importance of each of these separations in industry.

- Proton conductivity (2h) (CS) : A general overview of the different strategies (functionalization with acidic groups, open metal sites, encapsulation, pore size...) to optimize the transport properties of protons within the pores of MOFs will be given.

Chemical transformation (22h)

(i) Hydrogen production, water oxidation

- **Inorganic materials** (oxides, intermetallic, nitrides) **for an electrochemical production of H_2** through water splitting (electrochemistry) (4h) : the Bronsted-Evans-Polanyi (BEP) relationship that links physical properties of solid's surfaces to the kinetics for electrocatalyzed reactions such as the HER or the OER will be discussed. Based on this relationship, students will be given the tools to select and design the best catalysts for a given reaction. As well, the principles of coupled proton electron transfer (PCET) steps during which protons and electrons are simultaneously exchanged and that are the heart of OER, HER and CO_2 reduction reactions will be discussed for adsorbates on the surface of heterogeneous electrocatalysts. Finally, the impact of weak interactions such as hydrogen bonding networks or cation-water interactions at the solid/liquid interface on the kinetics of the OER and HER will be given, providing a molecular picture for interfacial reactions that is complementary to the one based on the sole physical properties of heterogeneous electrocatalysts.

- **MOFs for water splitting or O₂ oxidation** : (4h) CS + CM : the class of metal-organic frameworks will be introduced in the context of photocatalytic applications of OER and HER, with a specific emphasis on MOFs and related composites capable of capturing light in the visible. This course will cover the interest of using (i) selected MOFs intrinsic photoactive character and (ii) how take full benefit from their inherent porosity for the immobilization of catalysts (molecular species, nanoparticles, metal doping...) for water oxidation purposes, providing stable heterogeneous photocatalysts, highlighting the various synthetic strategies (one-pot-synthesis, encapsulation, covalent grafting), while discussing issues related to their solid-state characterizations and computational chemistry, their stability/recyclability, their interfacing (heterojunctions, 2D materials...), and finally pointing to their specificity in terms of reactions mechanisms when compared to their homogenous analogues.

(ii) CO₂ reduction

- **Molecular complexes, organic catalysis** (3h) GL : Molecular systems allowing the activation of CO₂ and H₂ under homogeneous catalytic conditions will be discussed. An overview of the state-of-the-art will be given, covering both transition-metal-based catalysts (with a particular focus on non-noble-metals such as Fe, Ni, Cu) and organocatalysts (e.g. N-Heterocyclic Carbenes (NHCs), Frustrated Lewis Pairs (FLPs)). Several transformations will thus be presented, e.g. the reduction-functionalization of CO₂ into valuable chemicals, the use of CO₂ as a C₁ building-block in fine chemical synthesis, as well as catalytic hydrogenation of organic compounds using either H₂ or one of its surrogates (formic acid, Hantzsch esters, ...). An important focus will also be put on the different strategies available to promote the interconversion of CO₂ with related C₁-building blocks such as formic acid or methanol.

- **MOFs (and composites)** (4h) CM + GM : This part will focus on the progress of MOFs and related composites for the CO₂ conversion encompassing the photocatalytic reduction, with a specific emphasis on robust high valence MOF capable of capturing light in the visible, as well the electrochemical or hydrogenation assisted CO₂ reduction. The different strategies to produce photoactive MOFs together with the different routes encompassing MOFs as versatile platforms for the heterogenisation of molecular or nanoparticulate species will be described (co-catalysts, promoters, photosensitizers, etc.), with the pros and cons of this family of materials to be systematically discussed. The specificities of porphyrinic MOFs will also be covered together with mechanistic aspects through computational approaches. Finally this course will end with short overviews about more recent concepts such as of the FLP-based strategies into MOF chemistry for the conversion of small molecules or (ii) the global concept of "capture & conversion".

- **Nanostructured inorganic materials** (3h) MF : the importance of CO₂ conversion with respect to the new energy technologies will be discussed to illustrate its impact on CO₂ mitigation, energy storage and carbon utilization, as well as the fundamental aspects of CO₂ reduction. Currently the most efficient catalysts for the electroreduction of CO₂ are solid materials. The different metals will be compared in terms of their reaction mechanisms and their resulting selectivity. A specific focus will be made on copper-based materials as they are unique in catalyzing CO₂ conversion to multicarbon compounds such as ethylene or ethanol, two key products of the chemical industry. Various strategies aiming at tuning the efficiency and selectivity of

heterogeneous catalysts, in particular copper-based ones, will be presented: (i) nanostructuring of surfaces; (ii) activation of surfaces with small ligands; (iii) surfaces with isolated metal sites; (iii) heterogeneized molecular catalysts etc. Finally part of the class will be devoted to the description of technological devices (electrolyzers, flow cells, membrane electrode assemblies) which are specifically designed for CO₂ reduction and of some examples of such cells coupled to solar panels in order to achieve artificial photosynthesis.

- Introduction to the activation of other small molecules (e.g. alkanes, N₂, NO_x...) (2h)
GL : a short overview of the principles and strategies enabling the activation of N₂ and of "inert" C-H bonds from small hydrocarbons (methane, ethane, ...) will be discussed. Classic transition-metal-based systems will be presented. A focus will be put on the correlation between the electronic structures of those complexes and their activity towards the targeted molecules. This course will be complemented by an overview of the current strategies to utilise MOFs (e.g. with open metal sites, immobilization of nanoparticles...) and related composites in order to activate small molecules. GM (2h)

Practical courses (4 h) (to be confirmed)

(iii) Photocatalytic production of H₂ from solar light simulator and water (ENS)

(iv) Electrochemical reduction of CO₂ or H₂ production (ENSCP)

Seminars (2 h)

Seminar given by an expert in N₂ transformation or in CO₂ capture / conversion.

Course 3 : Dynamic and Reconfigurable Polymers and Soft Materials

Objectives:

The objective of this course is to give students an overview of the engineering of dynamic and reconfigurable polymers in materials and biomimicry. We offer an interdisciplinary approach to soft matter and polymers: from molecular / macromolecular chemistry to physicochemical and mechanical properties.

The following systems and/or concepts will be covered:

- Synthesis, characterization and specific properties of dynamic covalent polymer networks
- Sequence-controlled and semi-crystalline polymers: organization, interfaces, specific properties
- Impact of the presence and spatial organization of dynamic bonds onto the properties and processing of dynamic covalent polymer networks
- Responsive polymers: gels and interfaces
- Light-responsive assemblies
- Soft materials based on thermotropic and lyotropic liquid crystal polymers

Prerequisites:

Basics in polymer and soft matter: chemistry, physicochemical and mechanical properties, thermodynamics.

Content of the class:

Part 1: Synthesis, chemistry and characterization of dynamic covalent polymer networks (10 hrs, RN)

In this part, we will discuss the different synthetic routes that can be followed to prepare dynamic covalent networks, including the direct polymerization of functional monomers, the crosslinking of functional thermoplastics and the reactive processing of conventional (un-functional) thermoplastics. Both fundamental and practical aspects will be covered. The fundamentals of dynamic covalent chemistry (kinetics, thermodynamics, stimuli) will be presented in the context of polymer networks. The characterization of dynamic covalent polymer networks will be presented and the specific properties of these materials, such as reshapeability, recyclability, self-healing ability, will be illustrated.

Part 2: Sequence-controlled and semi-crystalline polymers: organization, interfaces, specific properties (8 hrs, FT)

In this part, we will discuss systems where the regularity of the polymer chains induces cooperative assembly mechanisms. While providing a high degree of cohesion, promoter of macroscopic properties such as rigidity, resistance to creep, low solubility, low diffusivity to molecules and gases, these interactions remain essentially non-covalent and reversible. Another of their characteristics is to be specific without however requiring any particular chemical function. They are also found at work both in polyethylene, the simplest polymer imaginable, and in complex sequences composed exclusively of functional monomers such as collagen.

Two main families of systems will be covered:

- 1 - semi-crystalline polymers and vitrimers
- 2 - sequence-controlled synthetic polymers ("precision polymerization")

Part 3: Dynamic bonds: from the molecule to processing and final material properties (8 hrs, CC)

The objective of this part is to acquire the basic vocabulary and notions to understand how the properties and processing of materials are affected by the presence and spatial organization of dynamic bonds. The idea is to connect molecular concepts like bond energy, entropic elasticity, bond lifetime and force-activated scission, with macroscopic properties such as viscoelasticity and viscosity, fracture toughness, energy dissipation upon cyclic loading. Special effort will be made to introduce two advanced topics:

- 1 - the notion of non-linear properties: from finite chain extensibility to macroscopic strain stiffening. Role of the network architecture on the macroscopic properties.
- 2 - the incorporation of mechano-sensitive molecules in networks to detect and quantify forces on bonds and bond scission with optical signals.

Part 4: Responsive polymers: gels and interfaces (8 hrs, YT)

The objective of this part is to provide an overview of responsive polymers. We will discuss how to drive molecular interactions to induce reversible macroscopic change in structure and properties. We will focus on responsive gels and interfaces and will address some innovations for soft materials and biotechnologies.

- 1 - Responsive properties

How does change of conformation at molecular scale induce change of macroscopic properties (in solutions or at interfaces)?

Which stimuli? Temperature, pH, salt, light, electric or magnetic field...

Which polymers? How to play with weak interactions? Dynamic bonds. Reversibility. Intermolecular interactions with weak energy (hydrogen bond, electrostatic, hydrophobic).

Responsive polymers. Good/Bad solvent. LCST/UCST. Polyelectrolyte, counterions, osmotic pressure.

2 - Responsive hydrogels

Architecture of hydrogels. From molecules to polymer networks. Simple and more complex networks. Physical and chemical crosslinks. Applications to injectable hydrogels

3- Responsive interfaces

Polymer thin layers. Hydrogel films. Synthesis and characterization. Physico-chemical properties. Applications to sensors and actuators

Part 5: Light-responsive assemblies (6 hrs, CT)

Light-responsive organic assemblies have important developments in the biomedical field (optogenetics, phototherapies) and in material science (nanomotors, optical devices). The control of complex, dynamic systems by light offers a remote, non-invasive trigger, that can easily be applied with high spatial and temporal resolution. This part will cover up-to-date methods and design strategies of light-switchable surfactant-based and polymer-based systems. Lectures and (a few representative) case studies will review:

- the main classes of molecular switches, i.e. photoconversion of light-sensitive groups (photochromes, photocages) and use of nanoparticles to generate photothermal or photocatalytic reactions;
- the principles and practical constraints to achieve amplification from molecular up to macroscopic scale via perturbation of interfacial assemblies, phases separation, sol-gel transitions, with application in actuation;
- recent illustrations of out-of equilibrium dynamics (microflow, microswimmers), emphasizing the fundamental difference between quasi-equilibrium evolution between (photo)stationary states and dissipative systems.

Part 6: Smart soft materials based on thermotropic and lyotropic liquid crystal polymers (8 hrs, M-H L)

In this part, we will treat liquid crystal (LC) systems of polymers, which exhibit exciting potential as smart soft materials.

Two main families of systems will be covered:

1 - Thermotropic LC polymers and elastomers as soft actuators and sensors

Thermotropic liquid crystals are typically fluids made of relatively stiff and rod-like molecules (called mesogens) with long-range orientational order. The simplest LC phase is the nematic phase, in which the mean ordering direction of the mesogens is uniform. Long polymer chains incorporating mesogens in their chemical structures can also form a nematic phase (nematic polymers). The anisotropic characters (self-organization) of LC polymers and their conformational changes (entropic elasticity) upon external stimuli are the key to the exceptional properties of materials made of LC polymers and elastomers. We will discuss in detail some examples of actuators and sensors made of LC polymers and elastomers.

2 - Lyotropic LC polymers: amphiphilic block copolymers self-assembled in water

In this part we will focus on polymer micelles and vesicles, which belong to the normal (oil-in-water) self-assembled nanostructures, and polymer cubosomes and hexosomes, which belong to the inverted (water-in-oil) self-assembled nanostructures. These polymer colloids have diameters, membrane thicknesses or lattice sizes of up to one order of magnitude higher than small molecular colloids. More interestingly, the colloidal properties can be adjusted by the almost unlimited possibilities offered by polymer chemistry that allow to synthesize polymers with many different chemical structures. Stimuli-responsive properties of these polymer colloids will be highlighted for potential application in controlled delivery.

Faculty:

Costantino Creton (Part 3, 8 hrs); Min-Hui Li (Part 6, 8 hrs); Renaud Nicolay (Part 1, 10 hrs, coordinator), François Tournilhac (Part 2, 8 hrs), Christophe Tribet (part 5, 6 hrs); Yvette Tran (Part 4, 8 hrs, coordinator)

Evaluation:

Project of students

Analysis and discussion of research articles and/or experimental data

Course 4 : Coupling analytical techniques for *in operando* monitoring of local events

Educational goals

The development of analytical methods is closely related to advances of complementary in-situ microscopies, spectroscopies, spectrometric techniques etc.... Their combination provides a wealth of new information on structure changes, reaction pathways and local events determining and/or taking place during chemical or biological reactions. This course will gather contributions highlighting recent methodological and topical developments in the field and those predicted to be important in the near future. It will be composed of 4 parts of 12 h each, including one session of application (TD; 1,5 h) and one seminar (1,5h)

Positioning (compared to the existing offer in the M2 Chemistry Paris Centre and the other PSL masters)

Prerequisite

It is necessary to know the basics and principles of the techniques that will be discussed and deepened. Also, general culture in the field of analytical techniques in chemistry, physics and chemistry, spectroscopy will be a plus. In particular:

- Know the basics of thermodynamics and electrochemical kinetics: electrode potential, current-tension curves, load transfer, material transport
- Know the principal forces and interactions that control the performances of separation method and how to evaluate these methods in terms of recovery rate, separation selectivity, concentration factor,
- Know the physical principles of NMR and optical spectroscopies.
- Know how a simple NMR experiment is performed.

Course structure

- **coupling electrochemical microscopy SECM and AFM/STM for in situ monitoring of substrate morphological changes and reactivity (Fethi Bedioui, Chimie ParisTech)**

In order to enrich and complete its capacities for local electrochemical reactivity characterization, and to further increase its role in the development of nanosciences, electrochemistry has had to associate itself with, high-performance surface analysis techniques allowing, if possible simultaneously, local physico-chemical analysis in situ, with optimal spatial resolution. It is in this context that the techniques known as "probe scanning" have gradually become essential in the study of interfacial electrochemical processes, initially at the micrometer scale, and then at the nanometer or even atomic scale. Considerable efforts have been made to bring

together the electrochemistry of the two scanning probe techniques (SPM), which are only slightly older than scanning electrochemical microscopy SECM, namely scanning tunneling microscopy (STM) and atomic force microscopy (AFM) . These efforts have consisted in showing how these two techniques have made it possible to multiply tenfold the contributions of electrochemistry in the field of nanosciences by providing it with the means to generate, modify and above all very widely characterize nanostructured or nanofunctionalized electrochemical interfaces as well as electrogenerated nanoobjects, no longer globally but very locally with nanometric or even atomic resolution depending on the working conditions and the technique used. This course introduces precisely the AFM/electrochemistry and STM/electrochemistry couplings and their most developed applications.

- coupling of electrochemical techniques with ICP emission spectrometry, on-line volumetric measurements, gravimetric measurements for in situ investigation of interfacial reaction kinetics (corrosion/dissolution of metals and alloys) (Kevin Ogle, Chimie ParisTech)

The characterization of interfacial processes at the metal / electrolyte interface are of paramount importance for research in many fields such as corrosion, energy storage and electrocatalysis. Electrochemical measurements provide rich and meaningful kinetic information on the underlying faradaic processes but are often insufficient to identify the chemical mechanisms of these processes, limiting their utility as predictive tools. As a complement to conventional electrochemical information, we would like to know how the individual elemental constituents of a material react with the environment? What are the stoichiometries of dissolution, film formation, and electron exchange? Do alloy components dissolve selectively, leaving behind other components in the form of oxide films or dealloyed metallic layers? Can non-faradaic corrosion processes such as oxide dissolution or the release of intermetallic particles or metallic grains be detected and quantified? To this end, it is necessary to couple the electrochemical techniques with other real time analytical methods so as to quantify the elementary reactions and processes that contribute to an electrochemical response. The focus of this course will be on the coupling of spectroscopic solution analysis with electrochemistry (spectroelectrochemistry) in which the solution composition is monitored as a function of time during transient electrochemical measurements. Spectroscopic techniques such as UV-Visible, ICP atomic emission spectrometry, and ICP – mass spectrometry will be described. Significant applications will be reviewed, and the basic theory of quantification, time resolution, and transfer functions will be developed. Frequency resolved methods may also be discussed such as electrochemical impedance spectroscopy. In addition, non-spectroscopic measurements such as gravimetric techniques with a quartz crystal microbalance or real time volumetric gas measurements will be presented.

- coupling optical techniques (IR, Fluorescence) and NMR imagery (and electrochemistry) for in situ monitoring of biological events (Bich Thuy Doan, Chimie ParisTech & Laurent Thouin, ENS)

In the context of development of nanosciences in biology and medicine, spectroscopy and imagings with Optics or Magnetic Resonance are widely used as non-invasive technologies with their high specific performance to investigate

biological phenomena in living tissues. Optics provides high sensitivity to investigate the dynamic behavior of fluorescently labelled moieties and their interactions in biological environment, solutions, cells and tissues. Magnetic Resonance technologies provide structural and chemical information of organic molecules with spectroscopy and, exceptional images contrast and high 3D spatial resolution with imaging. Electrochemical commands aimed at modulating the fluorescence of molecules are also particularly exploited in this field, considering that many analytes are redox-active and can be detected/mapped with high sensitivity through fluorescence. These techniques require optical or MR probes to be grafted on molecular or nanoparticulate scaffolds or can count on natural signal of intrinsic biological molecules.

In order to study with precision, the biological information investigated, couplings of the optical and MR techniques, or coupling of optical and electrochemical techniques, in spectroscopy and/or imaging via the multimodality of probes or signals, as well as multiscale couplings (photonic microscopy) will improve the diagnosis. Coupling with optics with other in vivo imaging modalities is also of interest. This course introduces Optical / Magnetic Resonance spectroscopies and imaging couplings via multimodal chemical molecular or nanoparticulate probes design and presents their most developed applications in the biomedical field for biological investigation diagnosis and evaluation of innovative therapies in vitro to in vivo. The electrochemically-promoted fluorescence modulation of organic fluorescent or fluorogenic probes will also be addressed to investigate important biological mechanisms and to monitor biological events.

- coupling multidimensional separations and detections (optical, electrochemical detection, mass spectrometry) towards integrated microfluidic devices (Fanny d'Orlyé, Chimie ParisTech)

In order to address the issue of analyzing always more complex samples, and to further increase their role in environmental and health sciences, separation methods (chromatographic or electrokinetic) must move towards multi-dimensional strategies as well as coupling with specific detection technologies to monitor the separation process but also consider complementary aspects, such as speciation, based on molecular (mass spectroscopy MS), functional (UV/Vis, Fluorescence, Electrochemistry) or elementary (ICP-MS) characterizations. Coupling two separation dimensions and separation to detection techniques is a real challenge, both from theoretical and technical points of view. To do so, analytical conditions must be optimized with regards to each operatory unit while being compatible with one another and coupling interfaces must preserve the overall analysis stability et performance at each step. In this context, perspectives offered by the miniaturization of analytical systems and the development of multiparametric microfluidic devices may enable to overcome several afore-mentioned challenges. Resulting multi-dimensional mapping are unprecedented with regards to the very high resolving power of multi-dimensional analysis. Nevertheless, it addresses the topic of data analysis, which is a critical component of any 2D-separation workflow.

Course 5 : Dynamics of molecular processes in biological systems

Goals

- Appreciate the importance of dynamical aspects and processes (e.g. conformational dynamics, transport) in explaining the function of biological macromolecules;
- Gain a comprehensive overview of the relevant timescales, and of the available experimental and simulation techniques to probe such processes;
- Understand how the synergy between experiments, simulations and theory can lead to a comprehensive molecular picture of the involved mechanisms;
- Apply these concepts to practical cases, including examples from the literature and projects that will be led by the students.

Pre-requisites

(essential)

Notions of thermodynamics (energy, entropy, free-energy, first and second principle)

Newtonian mechanics

Notions of statistical mechanics (thermodynamic ensemble, thermodynamic average, Boltzmann statistics)

Notions of chemical kinetics (elementary reactions, kinetic models, 0th/1st/2nd order reactions)

(recommended - some bibliographic references can be suggested)

Vector model of NMR

Classical mechanics (Hamiltonian, Lagrangian)

Basic notions of molecular biology (biomolecules, structure)

Syllabus

General introduction, overview of the class (GS - 1h)

1. *Key concepts, experimental and simulation techniques (34 h - CM 28h, TD 6h)*

Concepts and theories

Master equations for the study of dynamical processes (GS - CM 4h, TD 2h)

Kinetic models for enzymatic catalysis (DL - CM 2h, TD 1h)

Conformational motions, allostery, importance of transport and transfers in the cell (AT - CM 2h)

Chemistry of systems: kinetics and stoichiometry (PN - CM 3h)

Phase separation in biomolecular systems (FF - CM 1h)

Experimental tools

Biomolecular dynamics from microseconds to seconds from chemical exchange

NMR (FF - CM 4h, TD 1h)

Overview of other techniques // cryoEM, FRET, etc. (FF - CM 1h)

Microfluidics for controlled environments, analytics tools for dynamical networks (PN - CM 1h)

Simulation tools

Enhanced sampling techniques (EDD - CM 4h, TD 2h)

Tools for reactivity, EVB, QM/MM (DL - CM 4h)

Indirect dynamic techniques, NMA, PCA (AT - CM 2h)

2. *Practical cases from the literature, key questions and challenges (5h)*

5x1h devoted to 1 topic (FF, PN, DL, GS, EDD - 1h each), may include (TBD):

- Dynamical effects in enzymatic catalysis;
- Allostery: positive, negative allostery, long-range effects of mutations (lac operon?);
- Transport across the membranes: water, ions, NMs, nuclear pores;
- Networks of genetic regulations.

3. *Hands-on sessions: basic simulations, projects (7h)*

- Basic simulations and illustration the class' concepts: potential of mean force, kinetics of barrier crossing, NMA, clustering, Markov models, interpretation of NMR data (DL 2h, GS 2h, EDD 1h, FF 1h)
- Mini-projects based on literature and/or PI's work, each project includes some numerical analysis or very basic simulations. Max 6 groups/projects (1 per PI), 1-hr tutoring along the way. Short report and 2-hr poster session (GS - 2h)

Faculty

- Élise Duboué-Dijon, IBPC (CNRS) (8h)
- Fabien Ferrage (Assoc. Prof. ENS) (8h)
- Damien Laage (Assoc. Prof. ENS) (10h)
- Philippe Nghe (Assoc. Prof. ESPCI) (6h)
- Guillaume Stirnemann, IBPC (CNRS) (12h) - coordinator
- Antoine Taly, IBPC (CNRS) (4h)

Exams

Final exam (50%)
Mini-project (30%)
Continuous evaluation (20%)

Course 6 : Modeling and understanding of reaction processes

Contributors :

Theory : Ilaria Ciofini (i-CLeHS, ChimieParisTech), Frédéric Labat (i-CLeHS, ChimieParisTech),

Experimental approaches : Guillaume Lefèvre (i-CLeHS, ChimieParisTech), Laurence Grimaud (LBM-ENS), Maxime Vitale (LBM-ENS)

Objectives:

The aim of this module is to provide, through a limited number of key reactions in organometallic catalysis (cross-couplings catalyzed by Pd, Fe or Ni, Cu-catalyzed hydroamination of unsaturated derivatives), an overview of the experimental and theoretical approaches that can be used and combined to untangle complex reaction mechanisms.

From an experimental point of view, we propose to address different analytical techniques (spectroscopies, multinuclear NMR, cyclic voltammetry...) allowing to access structural, functional or kinetic data in order to propose structures of reaction intermediates or reaction mechanisms which are then compared and completed by theoretical predictions in order to rationalize a given catalytic process. Several examples will also be provided to present the experimental approaches adopted to rationalize a reaction mechanism on the basis of kinetic data (in particular determination of kinetically determining steps, use of Hammett correlations). Reminders of formal kinetics will also be given at the beginning of the course.

From a theoretical point of view, ab-initio approaches (DFT and post-HF) and their coupling with methods to describe the environment (solvation models, QM/MM approaches) will be illustrated by considering the reactions in homogeneous phase (solution) previously mentioned as an example. The possible extension of these methods to the description of the reactivity in confined or supported environment (heterogeneous catalysis) will also be briefly illustrated. Particular attention will be paid to the modeling of photo-activated reactions (photocatalysis) and to the methods allowing to describe the reactivity in the excited state.

Each student will also develop a bibliographic project on recent systems from the literature (8h).

A series of 4 seminars, given by invited researchers, will be organized in order to illustrate the state of the art and challenges in current research (4x2h).

Course structure : 8 h bibliographic project; 8 h seminars; 16 h experimental approaches; 16 h theoretical approaches

Prerequisites: Basic Organic and organometallic chemistry course (M1)

Evaluation : Written exam (70%), bibliographic project restitution (30%).

Course 7 : Optical Materials, from Design to Devices

Objectives: Inorganics and hybrids materials for optical applications such as photovoltaic, lighting, quantum information, imaging, sensor, etc. are developed under various shapes and sizes. These lectures will focus on the design; modelling preparation and practical use of these materials.

Detailed content:

Part 1: Photovoltaic materials and technologies: Introduction to semiconductors and to semiconductor junctions; fabrication of photovoltaic devices and panels; emerging technologies (Th. Pauporté, CNRS, Chimie Paristech) (9h including one seminar and one practical course) **and Modelling for photovoltaic:** electronic structure of semiconductors (bulk and interfaces; effect of defects); modelling of hybrid systems and properties (Frédéric Labat, Chimie Paristech) (3h)

Part 2: Engineering of colloidal optical inorganic nanomaterials. Semiconductor and metal nanocrystals, synthesis, surface and interface, functionalization and applications (T. Pons, INSERM, S. Ithurria, ESPCI) (12h including one seminar and one practical course).

Part 3: Color and colorimetry, LED and Laser chemistry and technologies, strategies and mechanisms of luminescence stimulation; (mechanoluminescence, OSL, thermoluminescence); (B. Viana, CNRS, Prof Attaché, Chimie Paristech) (12h including one seminar and one/two practical course)

Part 4: Switchable hybrid materials: spin crossover, photomagnetism, porosity, chemosensing (A. Tissot, CNRS, Prof Attaché, ENS) (6h) **Materials for optical quantum technologies:** introduction to quantum technologies, material design and fabrication, rare earth doped crystals, color centres in diamond, applications to quantum memories and sensors. (Ph. Goldner, CNRS, Chimie Paristech) (6h)

Prerequisite : Basics of inorganic materials; structures and properties, basics of optical spectroscopies; notions about materials characterization (structural and electronic properties)

Evaluation : Written exam and oral for retaken exam

Course 8 : Databases and statistical learning for chemical discovery

Objectifs pédagogiques :

- Repérer les types de données produites au cours d'une activité de recherche, les métadonnées associées et les enjeux de leur conservation
- Connaître les principales bases de données existantes en chimie
- Comprendre la méthode d'apprentissage statistique utilisée dans des travaux publiés, son mode de fonctionnement et ses limitations
- Mettre en œuvre une méthode d'apprentissage statistique sur des données de chimie

Positionnement (par rapport à l'offre existante dans le M2 Chimie Paris Centre et les autres masters de PSL) : pas d'UE spécifique sur les données, bases de données et apprentissage statistiques dans le M2 Chimie Paris Centre. Dans les autres masters, l'offre est essentiellement soit disciplinaire (physique, pharma, etc), soit très théorique (maths appliquées, informatique).

Prérequis : mathématiques de premier cycle (algèbre linéaire), formation M1 de chimie physique ; pas de prérequis stricts sur la chimie théorique, mais une formation M1 sera un plus.

Structure du cours :

- Bases théoriques (16 h)
 - Les données en chimie : métadonnées, stockage et curation, API
 - Les bases de données existantes : matériaux, molécules ; théoriques, expérimentales ; structures, propriétés
 - Fondamentaux de l'apprentissage statistique : machine learning, deep learning
 - Données et reproductibilité, démarche open science
- Cours-conférences sur les applications (16 h)
 - Relations structure/propriété, structures/activité ; méthodes QSAR/QSPR
 - Machine learning pour la chimie théorique : fonctionnelles, champs de forces réactifs, exploration et variables collectives, etc
 - Criblage à large échelle pour applications pharma, docking et méthodes avancées
- Projets par binôme (16 h)

Intervenants : François-Xavier Coudert, Carlo Adamo, Damien Laage, Jérôme Hénin, Maximilien Levesque / Aqemia

Modalités d'évaluation :

- 50% sur un examen écrit, portant sur les bases et les applications
- 50% sur la présentation des résultats de leurs projets

Course 9: Magnetic Resonance

Objectives:

- Give chemists the foundations to understand magnetic resonance (MR) spectroscopies and how MR can be used in many fields in chemistry, physics, and biology.
- Introduce MR spectroscopies (NMR and EPR) using a theoretical quantum mechanical framework
- Give chemists a link between the observables of magnetic resonance and molecular structure, dynamics, molecular orbitals and other chemical properties.
- Introduce the use of MR in various fields of research, ranging from materials, biological systems, cultural heritage, etc.

Prerequisites:

- Basic mathematics (linear algebra, calculus: differential equations/integrals, Fourier transform)
- Quantum mechanics: Dirac notation and algebra in Hilbert spaces, Pauli matrices, angular momentum operators and their properties
- Electronic structure of molecules and coordination complexes, ligand, and crystal field theories
- Basic classical physics: angular momentum, magnetic/electric dipole, and dipole-dipole interactions

Contents of the class:

Part 1: Fundamentals of Magnetic Resonance (8 hrs)

Vector model; quantum description; tensors notation; Hamiltonians of spin interactions (chemical shift; J coupling; dipolar couplings; quadrupolar interaction; g tensor; hyperfine interaction); General instrumentation aspect (magnet / rf / console)

Part 2: Dynamics and Relaxation (7 hrs)

Chemical exchange; Wangness-Bloch-Redfield theory of nuclear spin relaxation; Overhauser effect; Effects of dynamics in solution EPR; Overhauser DNP

Part 3: Continuous wave EPR (8 hrs)

Relevant systems and examples of applications; Instrumental and practical aspects; Physical interactions and spin Hamiltonian; EPR in fluids and isotropic interactions; EPR in solids and anisotropic interactions; Systems with spin $>1/2$; CW Electron Nuclear Double Resonance

Part 4: Time Domain Magnetic Resonance (16 hrs)

Product operators; coherence transfer; 2D NMR; Magic angle spinning; cross polarization; MQMAS; average Hamiltonian theory: Recoupling techniques; Pulsed EPR (Davies/Mims ENDOR/Hyscore)

Part 5: Hyperpolarization Techniques (6 hrs)

Dynamic nuclear polarization; optical pumping; ferromagnetic resonance

3 hours will be devoted to presentations by students and invited speakers (not included in syllabus)

Faculty:

Laurent Binet (8 hrs); Jean-Baptiste d'Espinose (10 hrs); Fabien Ferrage (coordinator; 12 hrs); Kong Ooi Tan (*future* coordinator, 15 hrs)

Evaluation:

Project (40 %)

Mid-term exam after part 3 (20 %)

Final Exam (40 %)

Course 10 : Entrepreneurship and Innovation (60h)

PSL's transverse innovation and impact entrepreneurship training program is a high-level program that combines classroom and distance learning courses. It is designed for master's, doctoral and post-doctoral students who want to learn the fundamentals of innovative design methods and the challenges of designing entrepreneurial projects in the field of scientific research. Combining a theoretical approach and design workshops in small groups, it allows students to work on concrete cases of invention development or impact entrepreneurship projects.

OBJECTIVES OF THE TRAINING

The objective of this cross-disciplinary training is to enable students to acquire the skills that will allow them to think about an innovation project and to design a business model strategy

- **Thinking an innovation project:** by acquiring the methods of innovative design applied to a scientific entrepreneurship framework;
- **Designing a business model strategy:** by studying the main business models and knowing how to apply them to concrete situations;

ORGANIZATION OF THE COURSE

With the exception of the course "Reasoning and acting in the unknown" which takes place in person during PSL week, the courses have been designed in blended learning: alternating asynchronous learning sessions at the student's own pace, and synchronous sessions in the presence of the teacher. The 60-hour cross-disciplinary training is organized around 2 main courses:

- **The unknown:** introduction to theories and methods of design and innovation (3 ECTS, 30h in-class)
- **Business model thinking for impact entrepreneurship** (3 ECTS, 17h synchronous, 13h asynchronous)

CALENDAR

| Période | Titre | Enseignants | Établissement | Rythme | Volume horaire | ECTS |
|-------------------------|--|---------------------------------|--------------------|--|----------------|------|
| 22/11/2021 - 26/11/2021 | Reasoning and acting in the unknown: introduction to theories and methods of design and innovation | Pascal Le Masson Benoit Weil | Mines Paris-PSL | Full week (9h-17h) | 30h | 3 |
| 3/12/2021 - 21/01/2022 | Business model thinking for impact entrepreneurship | Lionel Garreau | Dauphine Paris-PSL | 3h par per week for six weeks (Fridays 9h-12h) | 30h | 3 |

PROGRAM

1. Reasoning and acting in the unknown: introduction to theories and methods of design and innovation (3 ECTS)

This 30-hour face-to-face course, organized during PSL Week in November 2021, is an in-depth introduction to the foundations of CK theory and innovation management methods for learners wishing to enter innovation and scientific entrepreneurship programs. Alternating theoretical classes in the morning and application workshops in the afternoon, it will begin with a presentation of design theory and the challenges of thinking in the unknown, then will provide a history of the place of RID (research, innovation and development) in companies. He will then present the principles and functioning of the CK theory, to lead the learners to implement the CK method of innovation management applied to concrete cases. The course will continue on the links between design and science, and will then address the subject of the mission-based company in the context of the governance of the innovative company.

2. Business model thinking for impact entrepreneurship (3 ECTS)

This course is structured around 6 synchronous sessions of one to three hours, and asynchronous work sessions using selected readings and videos produced by the teachers. It will start with a definition of the business model concept, and then present the four main business model analysis models: the Business Model Canvas, the RCOV, the Causal Loop and the Triple Layer Business model Canvas. These models will be used to analyze practical cases of impact businesses. The course will continue with a presentation of ESG factors (environmental, social and governance) which will lead to the production of a wiki by the learners on the links between business model and impact entrepreneurship. Based on role-playing, analysis of practical business cases and interviews with entrepreneurs, learners will then be led to articulate the business model strategy in a business ecosystem and to anticipate the dynamics of business model development.

EVALUATION

Students are evaluated on:

- Attendance and participation during classes (15%)
- The completion of knowledge control quizzes (25%)
- The realization and the defense of a project in team or individual (60%)

TRAINING LOCATIONS

Mines Paris-PSL
Dauphine Paris-PSL
PSL-Lab

Syllabus

N° documenti: 44

Testi del Syllabus

Resp. Did. **CENCETTI FRANCESCA** **Matricola: 100846**

Docente **CENCETTI FRANCESCA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B012883 - BIOCHIMICA AVANZATA**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **BIO/10**

Tipo Attività: **C - Affine/Integrativa**

Anno corso: **1**

Periodo: **Secondo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|---|
| Lingua insegnamento | italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Sistema nervoso e neurotrasmettitori; sistema endocrino, principali ormoni e loro metabolismo. Mediatori locali: prostanoidi, citochine e fattori di crescita. Recettori di membrana e recettori nucleari. Trasduzione del segnale di membrana e principali effettori. Spegnimento del segnale. Modifiche co- e post-traduzionali delle proteine. Sintesi e smistamento delle proteine di secrezione e di membrana. Degradazione delle proteine. |
| Testi di riferimento | D.L. Nelson, M.M. Cox "I Principi di Biochimica di Lehninger" Ed. Zanichelli J.M. Berg., J.L. Tymoczko, L. Stryer "Biochimica" Ed. Zanichelli |
| Obiettivi formativi | Conoscenze: Struttura e funzione di neurotrasmettitori e ormoni. Recettori ormonali e trasduzione del segnale. Effettori cellulari. Modificazioni e localizzazione delle proteine nella cellula. Competenze acquisite: Basi molecolari della trasduzione del segnale, meccanismi di modificazione delle proteine, loro trasporto e localizzazione nella cellula. Basi molecolari della degradazione delle proteine. Capacità acquisite al termine del corso: approcci biomolecolari e biochimici allo studio dei recettori e degli effettori intracellulari nella trasduzione del segnale. Analisi ed interpretazione di risultati sperimentali attraverso rappresentazioni grafiche. Comprensione del progresso delle conoscenze nel campo della biochimica. |
| Prerequisiti | Insegnamenti contenenti i prerequisiti: Chimica generale, Chimica organica, Biochimica |

| | |
|--|---|
| Metodi didattici | CFU: 6. Numero di ore totali del corso (compreso il tempo dedicato ad assistere a lezioni, seminari, studio individuale, esami): 150 Numero di ore per studio personale e altre attività formative di tipo individuale: 102 Numero di ore relative alle attività in aula: 48 |
| Altre informazioni | Frequenza delle lezioni: Fortemente raccomandata Strumenti a supporto della didattica: pdf file contenenti le diapositive mostrate a lezione. Orario di ricevimento: Venerdì, 14-16, previo appuntamento e-mail, francesca.cencetti@unifi.it |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | L'esame finale consiste in un colloquio orale che ha lo scopo di accertare l'acquisizione delle conoscenze e delle abilità nella materia, ovvero l'acquisizione del risultato dell'apprendimento. Il colloquio è articolato in tre quesiti principali che lo studente deve saper affrontare in maniera appropriata consistente e corretta. |
| Programma esteso | Metabolismo del sistema nervoso e i principali neurotrasmettitori. Gerarchia del sistema endocrino e le principali ghiandole. Ormoni liposolubili e idrosolubili e loro metabolismo. Recettori ormonali. Trasduzione del segnale di membrana. Principali effettori: Proteine G trimeriche, adenilato ciclasi, fosfolipasi C, proteina chinasi cAMP dipendente, cGMP, inositolo trifosfato, calmodulina ed altre proteine calcio leganti, proteina cinasi C. Spegnimento del segnale: fosfodiesterasi e protein fosfatasi. Modifiche co- e post-traduzionali delle proteine: fosforilazione, glicosilazione e lipidazione. Traffico intracellulare di proteine. Degradazione delle proteine; proteasoma e ruolo dell'ubiquitina. |



Testi in inglese

| | |
|--|--|
| | italian |
| | The nervous system and neurotransmitters; the endocrine system, hormones and their metabolism. Local mediators: Prostanoids, cytokine and growth factors. Membrane and nuclear receptors. Signal transduction and downstream effectors. Molecular mechanisms that switch off signals, desensitization and down-regulation. Co- and post -translational modifications of proteins. Synthesis and trafficking of secretion and membrane protein. Protein degradation. |
| | D.L. Nelson, M.M. Cox "Lehninger Principles of Biochemistry" J.M. Berg., J.L. Tymoczko, L. Stryer "Biochemistry" |
| | Knowledge: structure and function of neurotransmitters and hormones. Hormone receptors, signal transduction and cellular effectors. Modifications and cellular localization of protein. Acquired skills: Molecular basis of signal transduction mechanisms of protein modification, transport and cellular localization. Molecular mechanisms of degradation of proteins. Expertise at the end of the course: biomolecular and biochemical approaches to study receptors and intracellular effectors in signal transduction. Analysis and interpretation of experimental results through graphical representations. Understanding of the present knowledge in the field of biochemistry. |
| | Courses to be used as requirements: Chemistry, Organic Chemistry, Biochemistry |
| | Total hours of the course (including the time spent in attending lectures, seminars, private study, examinations): 150 Hours reserved to private study and other individual formative activities: 102 Number of hours for Lectures: 48 |

Frequency of lectures: Strongly recommended
Teaching tools: Pdf files with the slides shown during the lectures.
Office hours: Friday, 14-16, upon e-mail appointment,
francesca.cencetti@unifi.it

The final exam consists of an interview aimed to ensure the acquisition of knowledge and skills, i.e. the acquisition of the learning outcome. The interview is organized into three main questions that the student must be able to deal appropriately consistently and correctly.

The metabolism of nervous system and neurotransmitters. Hierarchy of endocrine system. Classification of hormones and their metabolism. Hormone receptors. The signal transduction and cellular effectors: trimeric G proteins, adenylyl cyclase, phospholipase C, cAMP-dependent protein kinase, cGMP, inositol triphosphate, calmodulin and other calcium binding proteins, protein kinase C. Molecular mechanisms that switch off signals: phosphodiesterase and protein phosphatases. Co- and post-translational modifications of proteins: phosphorylation, glycosylation and lipidation. Intracellular protein trafficking. Protein degradation and the role of ubiquitin-proteasome system.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **FIASCHI TANIA** **Matricola: 097947**

Docente **FIASCHI TANIA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B012887 - BIOLOGIA MOLECOLARE**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **BIO/11**

Tipo Attività: **C - Affine/Integrativa**

Anno corso: **1**

Periodo: **Primo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|--|--|
| Lingua insegnamento | italiano |
| Testi di riferimento | Alberts, Biologia molecolare della cellula, Ed. Zanichelli |
| Obiettivi formativi | Lo scopo del corso è quello di dare una visione completa dei meccanismi molecolari che regolano la vita cellulare. |
| Metodi didattici | lezioni in aula |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | esame finale orale |
| Programma esteso | Generalità sulla cellula eucariote. Struttura e funzione del nucleo, dei mitocondri, del reticolo endoplasmatico liscio e rugoso. I lisosomi, i ribosomi. Membrana e trasporto. I lipidi della membrana plasmatica. Fluidità della membrana ed il colesterolo. Il trasporto attivo e passivo. Il trasporto del glucosio. Trasportatori costitutivi ed inducibili del glucosio. Esocitosi ed endocitosi. Sede dell'informazione genica ed organizzazione del genoma. Dogma della biologia, esperimento di Griffith, istoni, denaturazione del DNA. La replicazione del DNA. La struttura degli acidi nucleici. Gli enzimi che partecipano alla duplicazione del DNA. La forcella di replicazione ed il meccanismo di inizio della duplicazione del DNA nei procarioti e negli eucarioti. La telomerasi. Meccanismo della PCR. Il meccanismo della trascrizione. La maturazione del tRNA, rRNA e dell' |

mRNA. Real Time PCR: tipi di sonde per Real Time, quantificazione relativa ed assoluta. Il codice genetico, la traduzione e le mutazioni. I codoni, il meccanismo della sintesi proteica, incorporazione della selenocisteina, gli chaperoni molecolari, il proteasoma. Il controllo dell'espressione genica: meccanismi epigenetici, i fattori trascrizionali, l'RNA interference, il controllo traduzionale (esempio della ferritina e del recettore della transferrina). Il destino post-traduzionale delle proteine. La via citoplasmatica (trasporto di proteine nel nucleo, mitocondrio, perossisomi). La via vescicolare (trasporto di proteine nel reticolo). N-glicosilazione delle proteine nel RE. Il traffico vescicolare. Via secretoria costitutiva, regolata e via endocitica. Tipi di rivestimento delle vescicole di trasporto. N-glicosilazione delle proteine nel Golgi. O-glicosilazione. Trasporto di proteine ai lisosomi. Esempio di via secretoria regolata: il GLUT4. Endocitosi mediata da recettore (endocitosi del colesterolo). Il citoscheletro. I tre costituenti del citoscheletro. Il centrosoma. Le proteine motrici. La dinamica del citoscheletro: il fuso mitotico, la divisione cellulare, la motilità cellulare. La matrice extracellulare. Tipi di motilità e regolazione. Il ciclo cellulare. Cicline e CDK, la transizione G1/S e G2/M, p53 e Rb. Le cellule tumorali. Caratteristiche delle cellule tumorali, oncogeni ed oncosoppressori, ipossia ed HIF. Le cellule staminali. Mitosi e meiosi.



Testi in inglese

| | |
|--|---|
| | italian |
| | Alberts, Molecular biology of the cell, Ed. Zanichelli |
| | The purpose of the course is to give a complete picture of the molecular mechanisms regulating cell life. |
| | oral lessons |
| | final oral exam |
| | The eucaryotic cell: structure and function of the nucleus, mitochondria, endoplasmic reticulum, lysosomes and ribosomes. Membrane and transport. Plasma membrane lipids. Membrane fluidity and cholesterol. Active and passive transport. The glucose transport. Constituent and inducible glucose transporters. Exocytosis and endocytosis. Genomic information and genomic organization. Biology dogma, histones, DNA denaturation. DNA replication. The structure of nucleic acids. The enzymes involved in DNA duplication. Telomerase. PCR Mechanism. The mechanism of transcription. Maturation of tRNA, rRNA and mRNA. Real Time PCR: probes for Real Time, relative and absolute quantification. The genetic code, translation and mutations. Codons, protein synthesis mechanism, selenocystine incorporation, molecular chaperones, proteasome. Control of gene expression. Epigenetic mechanisms, transcriptional factors, RNA interference, transduction control (eg ferrite and transferrin receptor). The post-translational fate of proteins. The cytoplasmic pathway (transport of protein into the nucleus, mitochondrial, peroxisome). The vesicular route (transport of proteins in the lattice). N-glycosylation of proteins in RE. Types of transporting vesicles. N-glycosylation of proteins in Golgi. O-glycosylation. Protein |

transport to lysosomes. Example of regulated secretory path: GLUT4. Endocytosis mediated by the receptor (cholesterol endocytosis). The cytoskeleton. The three constituents of the cytoskeleton. The centrosome. Motor proteins. The cytoskeleton dynamics: mitotic melting, cell division, cellular motility. The extracellular matrix. Cellular Motility. The cell cycle. Cicle and CDK, the transition G1 / S and G2 / M, p53 and Rb. The cancer cells. Characteristics of cancer cells, oncogenes and oncosoppressors, hypoxia and HIF. Stem cells. Mitosis and meiosis.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **BANCI LUCIA** **Matricola: 074878**

Docente **BANCI LUCIA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B027329 - BIOLOGIA STRUTTURALE**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/03**

Tipo Attività: **B - Caratterizzante**

Anno corso: **1**

Periodo: **Primo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|--|
| Lingua insegnamento | Italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Elementi di struttura secondaria di proteine. Angoli torsionali e plot di Ramachandran. Motivi e domini strutturali. Principali fold proteici. Proteine di membrana. Protein Data Bank. Processo di: folding e modelli per descriverlo; folding in vivo e ciaperoni molecolari; aggregazione proteica. Strutture del DNA e interazione proteina-DNA. Strutture RNA. Tecniche strutturali: spettroscopia NMR diffrazione a raggi X, microscopia elettronica. Caratterizzazione di proprietà dinamiche di biomolecole. |
| Testi di riferimento | <ul style="list-style-type: none">- Carl Branden & John Tooze Introduction to Protein Structure- Jack Kyte Structure in Protein Chemistry.- Banci, Cantini "Structural features of proteins" in NMR of Biomolecules: Towards Mechanistic Systems Biology -Wiley Saranno inoltre forniti a lezione capitoli di libri e review article sui soggetti trattati. |
| Obiettivi formativi | Il corso ha lo scopo di fornire agli studenti conoscenze dettagliate di biologia strutturale, concentrandosi sullo studio approfondito dell'architettura e della morfologia delle macromolecole biologiche - in particolare proteine e acidi nucleici. Verra' discusso il rapporto struttura-funzione di classi particolarmente rappresentative di proteine e le basi molecolari del protein folding. Verranno inoltre fornite alcune nozioni di base sui principali metodi spettroscopici e biofisici utilizzati nella indagine strutturale di proteine, acidi nucleici e loro complessi e saranno fornite le conoscenze di base per la caratterizzazione strutturale delle macromolecole biologiche. |
| Prerequisiti | Nessuno |

| | |
|--|---|
| Metodi didattici | Numero di ore relative alle attività in aula: 48 Numero di ore relative ad attività di esercitazioni: 10 |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | L'esame prevede il superamento di una prova orale sugli argomenti trattati nel corso. Per sostenere la prova è richiesta l'iscrizione all'esame sul sito web di UniFi abilitato alla verbalizzazione elettronica. La lista viene chiusa due giorni prima della data di appello. Viene garantito il minimo numero di appelli e la docente è a disposizione ad inserire ulteriori appelli su richiesta degli studenti. Il calendario di esami per l'a.a. 2018/2019 è disponibile al link: https://sol.unifi.it/docprenot/docprenot Commissione di esame : L. Banci, M. Lelli, F. Cantini, V. Calderone |
| Programma esteso | La struttura primaria: amminoacidi e legame peptidico. Elementi di struttura secondaria delle proteine. Angoli torsionali e plot di Ramachandran. Motivi strutturali. Principali fold proteici e classificazione strutturale delle proteine. Struttura quaternaria. Protein data Bank (pdb) e varie banche dati. Proprietà delle membrane, strutture delle proteine di membrana. Interazioni non covalenti e Il processo di folding delle proteine: i fattori che lo determinano. Lo stato denaturato e lo stato molten globule. Metodologie per lo studio del folding e modelli per descriverlo i processi di folding in vivo. Chaperoni molecolari. Processi di aggregazione proteica e formazione di fibrille. Flessibilità e proprietà dinamiche delle proteine. Proprietà strutturali del DNA e interazioni proteina-DNA. Proprietà strutturali del RNA. Metodologie per la caratterizzazione strutturale e dinamica di macromolecole in cristalli, in soluzione, in cellule. Introduzione alle tecniche sperimentali per determinare la struttura 3D di biomolecole: spettroscopia NMR, cristallografia a raggi X e crio microscopia elettronica . Loro utilizzo per la caratterizzazione strutturale e dinamica di biomolecole. Tecniche strutturali integrate per la biologia strutturale a livello cellulare. Il corso prevede esercitazioni al computer e a spettrometri NMR. |



Testi in inglese

| | |
|--|---|
| | Italian |
| | Protein secondary structure elements. Torsion angles and Ramachandran plot. Motifs and structural domains. Main fold types in protein structures. Membrane proteins. Protein Data Bank. Protein Folding and Methods for studying. Folding processes in vivo and molecular chaperones. Protein aggregation. DNA Structures and protein-DNA interactions. RNA structures. Techniques for structure determination: NMR spectroscopy, X-ray diffraction, electron microscopy. Dynamic characterization of biomolecules. |
| | - Carl Branden & John Tooze: Introduction to Protein Structure - Jack Kyte Structure in Protein Chemistry. - Banci, Cantini "Structural features of proteins" in NMR of Biomolecules: Towards Mechanistic Systems Biology -Wiley Book chapters and review articles on specific subjects will be also provided to the students. |
| | The course aims at providing the students with a detailed knowledge of various aspects of structural biology, focusing on the fold and organization of biological macromolecules, particularly of proteins and nucleic acids. The relationship between structure and function for some selected classes of proteins will be discussed. The molecular basis for the protein folding process will be presented. The basic concepts of the spectroscopic and biophysical methods used for structural |

characterization, as well as of the major techniques (NMR spectroscopy, X-ray diffraction, and cryo-EM) for 3D structural determination will be presented.

Courses required: none
Courses recommended: none

Total number of hours for Lectures (hours): 48
Total number of hours for Laboratory-field practice : 10

The examination involves passing an oral exam on the topics covered in the course.

To take the exam, registration at the UniFi website, which enables electronic record of the exam, it is required. The list closes two days before the date of the examination.

It is guaranteed a minimum number of exam rounds and the teacher is available to enter further exam rounds upon student request.

The exam schedule for the academic year 2018/2019 is available at:
<https://sol.unifi.it/docprenot/docprenot>

Examination commission: L. Banci, M. Lelli, F. Cantini, V. Calderone

The primary sequence: the aminoacids and the peptide bond. Elements of secondary structure: helices, strands and sheets, turns. Torsion angles and Ramachandran plot. Structural motifs: helix-loop-helix, beta hairpin, Greek key, etc. Tertiary structure. Motifs and domains. The most common types of folds, classifies as alpha folds, beta folds, alpha/beta and alfa+beta. Quaternary structure. The structural classification of proteins. The Protein Data Bank (pdb). Properties of cellular membranes and membrane proteins structural features. Non covalent interactions and the folding processes in proteins. Structural stability of proteins. Approaches for characterizing the folding processes. The folding "funnel". The unstructured states. The transition states in the folding process. The molten globule state. In vivo folding processes. The function of molecular chaperons. Protein aggregation and fibril formation. Protein flexibility and dynamical properties of biomolecules. Approaches for the characterization of the overall and internal dynamics of macromolecules. The DNA structures and the interactions protein-DNA, in eukaryotic and in prokaryotic organisms. Structural features of RNA. Experimental methods for 3D structure determination. Basic knowledge of NMR spectroscopy, X-ray crystallography, and cryo-EM for the structural characterization and the determination of 3D structure of biomolecules. Integrated structural biology approaches for cellular structural biology.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **NATIVI CRISTINA** **Matricola: 095228**

Docente **NATIVI CRISTINA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B016282 - BIOTRASFORMAZIONI IN CHIMICA ORGANICA**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2019**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/06**

Tipo Attività: **C - Affine/Integrativa**

Anno corso: **2**

Periodo: **Primo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|--|
| Lingua insegnamento | italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Biotrasformazioni in chimica organica, vantaggi e limiti. Selettività degli enzimi e modelli relativi. Applicazioni delle varie classi di enzimi nella sintesi organica di laboratorio ed industriale, con particolare attenzione alla manipolazione di specifici gruppi funzionali. Enzimi idrolitici. Ossidoriduttasi. Liasi. Glicosiltrasferasi. Reazioni enzimatiche a cascata. Biocatalisi in sintesi totale. Esempi di biotrasformazioni non convenzionali. |
| Testi di riferimento | Kurt Faber, Biotransformation in Organic Chemistry, A textbook. Springer ed. 2011, Sesta edizione. |
| Obiettivi formativi | Il corso si propone di fornire agli studenti le conoscenze necessarie alla comprensione, all'utilizzo e allo sviluppo dei processi enzimatici impiegati per la sintesi e la trasformazione chimica di molecole di interesse biologico, farmaceutico ed industriale. Alla fine del corso gli studenti dovrebbero essere in grado di classificare gli enzimi in base alle reazioni catalizzate e di scegliere l'enzima appropriato per una data reazione. Inoltre verrà loro fornita una panoramica degli sviluppi più recenti nel campo delle biotrasformazioni e della sua interdisciplinarietà. |
| Prerequisiti | nessuno |
| Metodi didattici | lezioni frontali |

| | |
|--|--|
| Altre informazioni | Sono previsti esercizi e attività di didattica interattiva sull'impiego di enzimi in sintesi organica durante il corso |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | Esame orale. |
| Programma esteso | Biotrasformazioni in chimica organica, vantaggi e limiti. Selettività degli enzimi e modelli relativi. Applicazioni delle varie classi di enzimi nella sintesi organica di laboratorio ed industriale, con particolare attenzione alla manipolazione di specifici gruppi funzionali. Enzimi idrolitici (proteasi, esterasi, lipasi, fosfatasi, epossido idrolasi, nitrilasi) per l'idrolisi di legami C-N e C-O, per esempio in ammidi, idantoine, esteri, lattoni, lattami epossidi e esteri fosfato. Ossido-riduttasi nella riduzione di aldeide e chetoni, ossidazione di alcoli, idrossilazioni e diidrossilazioni. Uso delle liasi per la formazione di legami C-C e C-N. Glicosiltrasferasi e modificazioni posttraduzionali. Reazioni enzimatiche a cascata. Biocatalisi in sintesi totale. Esempi di biotrasformazioni non convenzionali: enzimi immobilizzati, enzimi modificati, cellule artificiali e anticorpi catalitici. |



Testi in inglese

| | |
|--|--|
| | italian |
| | Biotransformations in organic chemistry, advantages and limitations. Selectivity of the enzymes and models. Use of various classes of enzymes in the laboratory and in industrial organic syntheses with focus on the manipulation of specific functional groups. Oxido-reductases. Glycosyltransferase. Cascade enzyme reactions. Biocatalysis in total synthesis. Examples of non-conventional biotransformations. |
| | Kurt Faber, Biotransformation in Organic Chemistry, A textbook. Springer ed. 2011, Sixth ed. |
| | At the end of the course, the students should: be familiar with the concept of biotransformation/biocatalysis demonstrate understanding of the advantages and challenges of using biotransformations in synthesis and of the criteria for choosing between biocatalysts and inorganic/organic catalysts. be able to classify enzymes based on reaction types and to choose the appropriate enzyme for a given reaction be aware of recent developments in the field and of its interdisciplinarity |
| | none |
| | frontal lessons |
| | Exercises and other activities with direct participation of the students will be done during the course about the use of enzymes in organic synthesis |
| | Oral exams. |
| | Biotransformations in organic chemistry, advantages and limitations. Selectivity of the enzymes and models. Use of various classes of enzymes in the laboratory and in industrial organic syntheses with focus on the manipulation of specific functional groups. Hydrolases for the hydrolysis |

of C-N and C-O bonds in amides, hydantoins, esters, lactones, lactams, epoxides and phosphate esters. Use of oxido-reductases in aldehydes and ketones reduction, alcohols oxidation, hydroxylation and dihydroxylation reactions. Lyases and the formation of C-C and CN bonds. Glycosyltransferase for glycosylation of peptides/proteins and small molecules. Cascade enzyme reactions. Biocatalysis in total synthesis. Examples of non-conventional biotransformations: immobilized enzymes, modified enzymes, artificial cells and catalytic antibodies

Testi del Syllabus

| | | |
|-------------------|---|--------------------------|
| Resp. Did. | TRAVERSI RITA | Matricola: 098990 |
| Docenti | SEVERI MIRKO, 3 CFU TRAVERSI RITA, 3 CFU | |
| Anno offerta: | 2020/2021 | |
| Insegnamento: | B016284 - CHIMICA ANALITICA AMBIENTALE - COMPONENTI INORGANICI | |
| Corso di studio: | B088 - SCIENZE CHIMICHE | |
| Anno regolamento: | 2020 | |
| CFU: | 6 | |
| Settore: | CHIM/01 | |
| Tipo Attività: | B - Caratterizzante | |
| Anno corso: | 1 | |
| Periodo: | Secondo Semestre | |



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|--|
| Lingua insegnamento | Italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Lezioni frontali e attività di laboratorio su: 1. Tecniche di campionamento di aerosol atmosferico, trattamento del campione (mineralizzazione, estrazione degli analiti), controllo dei bianchi. 2. Analisi chimica per IC, F-AAS, GFAAS, ICP-AES e HG-AAS. Analisi della composizione elementare per PIXE e XRF (lezioni teoriche). 3. Prestazioni di un metodo analitico. Campioni certificati 4. Relazione finale sulle esercitazioni. |
| Testi di riferimento | Holler, Skoog, Crouch, "Chimica Analitica Strumentale", EdiSES; Skoog, Leary, "Chimica Analitica Strumentale", EdiSES; Cozzi, Protti, Ruaro, "Analisi Chimica Strumentale" Vol. a,b,c, Zanichelli; Bauer, Christian, O'Reilly, "Analisi Strumentale", Piccin. Brimblecombe, "Air Composition and Chemistry", Cambridge University Press |
| Obiettivi formativi | Principi delle tecniche analitiche avanzate più utilizzate (IC, FAAS, GFAAS, ICP-AES, ICP-MS) e loro applicazione alla determinazione di ioni, metalli ed elementi a livelli di concentrazione da ppm a ppt in campioni reali. Trattamento del campione. Estrazioni selettive. Controllo della contaminazione da manipolazione e dall'ambiente di laboratorio. Applicazione delle conoscenze acquisite ad un caso-studio: determinazione dei componenti principali e in tracce dell'aerosol atmosferico e uso dei marker chimici per la caratterizzazione delle sorgenti emissive e dei processi di trasporto. Acquisire: Capacità di gestire autonomamente l'analisi chimica di componenti inorganici in campioni ambientali attraverso tecniche strumentali; Capacità di gestire il campionamento, il trattamento e la conservazione di matrici ambientali preservandole da effetti di contaminazione; Controllo di qualità del dato analitico. |

| | |
|--|--|
| Prerequisiti | Corsi vincolanti: Chimica Analitica II e Laboratorio di Chimica Analitica II Corsi raccomandati: Metodi strumentali in Chimica Analitica |
| Metodi didattici | Lezioni frontali. Esercitazioni in laboratorio. Piattaforma e-learning Moodle. |
| Altre informazioni | Frequenza delle lezioni e delle esercitazioni vivamente consigliata. Strumenti a supporto della didattica: videoproiettore. |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | Colloquio orale composto da tre domande sugli argomenti del corso. La relazione relativa alle esercitazioni di laboratorio svolte (da consegnare almeno alcuni giorni prima dell'esame) costituisce uno dei criteri di valutazione. |
| Programma esteso | <p>Il corso è focalizzato sull'approfondimento di metodologie analitiche innovative per la determinazione di componenti inorganici (composizione ionica, metalli pesanti, speciazione) e sulla loro applicazione all'analisi di matrici ambientali reali.</p> <p>Il corso è strutturato in lezioni frontali ed esercitazioni di laboratorio, secondo le seguenti tematiche:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Campionamento di matrici reali - Significatività di un campionamento. Tecniche di campionamento per componenti gassosi, liquidi e solidi. Conservazione del campione. Contenitori per campioni. Procedure per la riduzione della contaminazione durante il campionamento e la conservazione. 2. Trattamento dei campioni - Sub campionamento. Decontaminazione. Separazione selettiva degli analiti. Processi di eliminazione o riduzione della matrice. Estrazione. Mineralizzazione. Processi di pre-concentrazione. Controllo della contaminazione nelle fasi di trattamento del campione. Controllo dei bianchi. 3. Analisi chimica - Approfondimento di tecniche analitiche avanzate: Cromatografia Ionica (IC), Spettrofotometria di Assorbimento Atomico con atomizzazione a Fiamma (F-AAS) e Fornetto di Grafite (GFAAS) e sistemi di generazione di idruri, Spettrofotometria di Emissione atomica con plasma con rivelazione ottica (ICP-AES) e con rivelatore di massa (ICP-MS), sistemi di emissione per fluorescenza a raggi X (PIXE, XRF). 4. Valutazione delle caratteristiche di un metodo analitico. Riproducibilità, accuratezza, detection limit, sensibilità, selettività. Uso di campioni certificati. Normative vigenti sui valori guida e sulle tecniche di analisi per campioni ambientali. <p>Attività di laboratorio: 1 Campionamenti di deposizioni umide e secche (es. aerosol atmosferico, polveri) in ambito locale. 2. Trattamento dei campioni raccolti. Mineralizzazione con sistemi a micro-onde. Estrazione della componente solubile e/o solubilizzabile con bagno ad ultrasuoni. Risospensione e raccolta del particolato insolubile per analisi di superficie. 3. Analisi degli estratti dei campioni raccolti per IC, F-AAS, GF-AAS, ICP-AES e HG-AAS 4. Valutazione delle prestazioni analitiche dei metodi utilizzati attraverso la determinazione della riproducibilità, della sensibilità e del detection limit. 5. Relazione finale sulle procedure seguite e i risultati ottenuti in tutte le determinazioni analitiche dei campioni reali.</p> |



Testi in inglese

Italian

Lectures and laboratory exercises on:

1. Techniques for sampling of atmospheric aerosol, sample treatment (acidic digestion, extraction) and blank check.
2. Chemical analysis by using IC, F-AAS, GF-AAS, ICP-AES, HG-AAS. Elemental composition determination by PIXE and XRF (lectures and survey of available facilities).
3. Performances of analytical methods. Certified samples.
4. Final report on the lab practice.

Holler, Skoog, Crouch, "Chimica Analitica Strumentale", EdiSES;
Skoog, Leary, "Chimica Analitica Strumentale", EdiSES;
Cozzi, Protti, Ruaro, "Analisi Chimica Strumentale" Vol. a,b,c, Zanichelli;
Bauer, Christian, O'Reilly, "Analisi Strumentale", Piccin.

Brimblecombe, "Air Composition and Chemistry", Cambridge University Press

Lectures.
Laboratory exercises.
e-learning Moodle.

Attendance of lectures and lab exercises strongly recommended.
Teaching tools: videoprojector.

Final oral examination based on three questions. The final report (to be delivered at least a few days before the examination) represents one evaluation criterion.

The class is focused on detailed presentation of up-to-date analytical methods devoted to the measurements of inorganic components (ionic composition, heavy metals, speciation) and their application to the analysis of real environmental matrices.

Both lectures and laboratory practices are planned, tackling the following topics:

1. Sampling of real matrices - Representativity of a sample and related techniques. Sample conservation (protocols and materials). Procedures for minimizing contamination during sampling, storage and analysis.
2. Sample treatment - Subsampling, decontamination, selective separation of the analytes. Reduction or removal of the matrix. Digestion. Pre-concentration processes. Check of contamination during the different steps of sample treatment. Blank check.
3. Chemical analysis - Advanced analytical techniques: Ion Chromatography (IC); Atomic Absorption Spectrophotometry with Flame (F-AAS) and Graphite Furnace (GF-AAS) Atomization and Hydride Generation systems (HG-AAS); Atomic Emission Spectrophotometry with Inductively Coupled Plasma and optical detection (ICP-AES) and mass spectrometry detection (ICP-MS); X ray emission techniques (PIXE, XRF).
4. Assessment of the performances of an analytical method. Reproducibility, accuracy, detection limit, sensitivity, selectivity. Use reference materials Current regulations on concentration values and techniques for the analysis of environmental samples.

Laboratory practice:

1. Samplings of wet and dry depositions (e.g. atmospheric aerosol atmosferico, dust) at local scale.
2. Treatment of collected samples. Micro-wave assisted acidic digestion. Extraction of soluble and "available" components by ultrasonic bath. Resuspension and collection of insoluble aerosol.
3. Chemical analysis of extracted fractions by IC, F-AAS, GF-AAS, ICP-AES e HG-AAS
4. Assessment of analytical performances of the used method (reproducibility, sensitivity, detection limit).
5. Final report on the accomplished lab practice and achieved results on real samples.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **CINCINELLI ALESSANDRA** **Matricola: 098945**

Docente **CINCINELLI ALESSANDRA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B016283 - CHIMICA ANALITICA AMBIENTALE - COMPONENTI ORGANICI**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/01**

Tipo Attività: **B - Caratterizzante**

Anno corso: **1**

Periodo: **Secondo Semestre**



Testi in italiano

Lingua insegnamento Italiano

Contenuti (Dipl.Sup.) Contaminanti organici e loro tossicologia. Analisi dei composti organici in matrici reali. Tecniche di campionamento per acqua, atmosfera, suolo e prodotti alimentari. Conservazione e pretrattamento del campione. Trattamento del campione. Analisi chimica. Cenni ai metodi di analisi chimica strumentale. Accuratezza del metodo. Materiali di riferimento, campioni certificati. Bianchi. Sensibilità. Limite di rilevabilità. Calibrazione. Attività di laboratorio e rielaborazione dei dati.

Testi di riferimento Roger Reeve, Introduction to environmental analysis. Fifield-Kealey: Principles and practice of analytical
Le analisi chimiche ambientali - II Edizione
Edizione riveduta e ampliata utile per le analisi secondo la normativa IPPC
Data di Pubblicazione: Giugno 2009
Biagio Gianni
I.C.S.A.

Obiettivi formativi Il corso approfondisce le tecniche di estrazione e di analisi di varie matrici ambientali al fine di determinare composti organici a livelli di tracce. Contaminanti organici e loro proprietà chimico fisiche. Trasporto degli inquinanti nell'ambiente e loro determinazione in varie matrici ambientali. Analisi di acqua, aria, suolo e biota. Analisi strumentale: GC, GC-MS e HPLC.

Prerequisiti Corsi vincolanti: nessuno

| | |
|--|--|
| Metodi didattici | Numero di ore relative alle attività in aula: 24 Numero di ore relative ad attività di esercitazioni (in laboratorio e in campo): 36 |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | Prova Orale. Presentazione in powerpoint di una problematica ambientale. |
| Programma esteso | 1) Contaminanti organici e loro tossicologia 2) Analisi dei composti organici in matrici reali- Tecniche di campionamento per acqua, atmosfera, suolo e prodotti alimentari. conservazione e pretrattamento del campione. 3) Trattamento del campione-Procedure di estrazione (es.: liquido/liquido, liquido/solido, estrazione in fase solida (SPE), microestrazione in fase solida (SPME), accelerated solvent extraction (ASE). Concentrazione e clean-up. Separazione delle varie classi di contaminanti organici. 4) Analisi chimica- Cenni ai metodi di analisi chimica strumentale. Principi di cromatografia. Gas-cromatografia (GC), gas-cromatografia accoppiata con spettrometro di massa (GC-MS). Materiali di riferimento, campioni certificati. Bianchi. Sensibilità. Limite di rilevabilità. Calibrazione. Attività di laboratorio: 1) campionamento di acque superficiali, aerosol, aria, e terreno in ambito regionale 2) Trattamento dei campioni raccolti (matrici ambientali) e prodotti alimentari. Filtrazione. Estrazione degli analiti con bagno ad ultrasuoni, soxhlet ed estrattore liquido/liquido. Purificazione del campione 3) Analisi degli estratti organici mediante HPLC, GC, GC-MS, GC-MS-MS. 4) Elaborazione dei dati e relazione finale per l'analisi dei campioni reali. |



Testi in inglese

| | |
|--|--|
| | Italian |
| | Organic contaminants and their toxicology. Analysis of organic compounds in real matrices. Air, water, soil sampling techniques. Extraction methods (i.e: liquid/liquid extractions, solid/liquid extractions, SPE, SPME, ASE etc). Concentration and clean up. Reference materials, lab blanks, calibration curve. Laboratory activity and data elaboration. |
| | Roger Reeve, Introduction to environmental analysis. Fifield-Kealey: Principles and practice of analytical Le analisi chimiche ambientali - II Edizione Data di Pubblicazione: Giugno 2009 Biagio Gianni I.C.S.A. |
| | Aim of this course is to deep the knowledge of extraction techniques and analysis of various environmental matrices (air, water, soil) in order to determine trace organic compounds. Organic contaminants and their chemical physical properties. Transport of pollutants in the Environment and approaches to their analysis. water analysis: trace pollutants. Atmospheric analysis: aerosol, gas. Sediment and biota analysis. Instrumental analysis |
| | Courses required: none |

Contact hours for: Lectures (hours): 24
Contact hours for: Laboratory (hours): 36

Oral exam. Power point presentation on an environmental topic.

1) Organic contaminants and their toxicology 2) analysis of organic compounds in real matrices. Air, water, soil sampling techniques. 3) extraction methods (ie: liquid/liquid extractions, solid/liquid extractions, SPE, SPME, ASE etc). Concentration and clean up.4) Gas chromatography and GC-MS, HPLC,. 5) reference materials, lab blanks, calibration curve, LOD.

Laboratory: water, air, soil sampling. Extraction of different matrices. Instrumental analysis. Data elaboration.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **CARRETTI EMILIANO** **Matricola: 167086**

Docente **CARRETTI EMILIANO, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B030021 - CHIMICA ANALITICA PER I BENI CULTURALI**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2019**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/01**

Tipo Attività: **C - Affine/Integrativa**

Anno corso: **2**

Periodo: **Secondo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|--|---|
| Lingua insegnamento | Italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Descrizione delle principali tecniche analitiche comunemente impiegate nel settore della conservazione dei beni culturali |
| Testi di riferimento | slides e dispense |
| Obiettivi formativi | conoscenza delle principali tecniche analitiche strumentali e loro applicazione nel campo della conservazione dei beni culturali |
| Prerequisiti | conoscenza dei principi della chimica e della chimica analitica di base Corsi vincolanti: nessuno Corsi raccomandati: nessuno |
| Metodi didattici | lezioni frontali e esercitazioni di laboratorio |
| Altre informazioni | Frequenza delle lezioni ed esercitazioni: Altamente consigliata. |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | oral |

Programma esteso

- La chimica e i Beni culturali: introduzione ai materiali di interesse nel campo dei beni culturali e alle principali tecniche pittoriche e artistiche. I pigmenti, i leganti pittorici (leganti polisaccaridici, proteine e oli siccativi), resine terpeniche
- Preparazione e analisi di sezioni lucide
- Strategie di intervento nell'ambito di un cantiere di restauro
- Strategie do campionamento: analisi invasive, microinvasive e non invasive

TECNICHE ANALITICHE E LORO APPLICAZIONI NEL CAMPO DEI BENI CULTURALI

- La microscopia ottica
- Analisi e percezione del colore
- La spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier (FTIR)
- La microscopia elettronica a scansione (SEM) accoppiata con microsonda per analisi di raggi x a dispersione di energia (EDX)
- Analisi cromatografica e spettrometria di massa
- Analisi mediante spettrometria di massa di ioni secondari con analizzatore a tempo di volo (TOF-SIMS)
- Analisi mediante diffrazione di raggi X (XRD) e fluorescenza di raggi X (XRF)
- Datazione al radiocarbonio

La descrizione delle suddette tecniche analitiche sarà corredata da esempi applicativi relativi a manufatti reali e a cantieri di restauro e da alcune esercitazioni dimostrative di laboratorio in cui verranno analizzati campioni appartenenti a manufatti reali



Testi in inglese

| | |
|--|---|
| | Italian |
| | Description of the analytical techniques commonly used in the field of cultural heritage conservation |
| | slides and handouts |
| | knowledge of the analytical techniques commonly used in cultural heritage conservation and their possible application in this field |
| | knowledge of the principles of chemistry and of the basic analytical chemistry Courses required: none Courses recommended: none |
| | lectures and laboratory lessons |
| | Frequency of lectures, practice and lab: Highly recommended |
| | oral |

- Chemistry for Cultural Heritage: introduction to the materials of interest in the field of Cultural Heritage and to the most important pictorial and artistic techniques. Pigments, binding media (polysaccharides, proteins and siccative oils), terpenic resins
- Preparation and analysis of cross sections
- Conservation strategies in the frame of a restoration workshop
- Sampling strategie: invasive, micro-invasive and not-invasive sampling

ANALYTICAL TECHNIQUES AND THEIR APPLICATIONS IN THE FIELD OF CULTURAL HERITAGE

- Optical microscopy
- Color analysis
- Infrared spectoscopy (FTIR)
- Scanning Electron Microscopy (SEM) coupled with X ray energy dispersion microprobe (EDX)
- Cheromatographic analysis and mass spectrometry
- Analysis through mass spectrometry of secondary ions with time-of-flight analyser (TOF-SIMS)
- X ray diffraction (XRD) and X ray fluorecence (XRF)
- Dating through radiocarbon analysis

The description of the above mentioned techniques will be accompaied with applicative examples on real artifacts and real restoration workshops and by some lab demonstrative experiences where some real samples will be analyzed

Testi del Syllabus

Resp. Did. **PAPINI ANNA MARIA** **Matricola: 092993**

Docente **PAPINI ANNA MARIA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B012895 - CHIMICA BIORGANICA**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/06**

Tipo Attività: **B - Caratterizzante**

Anno corso: **1**

Periodo: **Secondo Semestre**



Testi in italiano

Lingua insegnamento Italiano e se richiesto da tutti gli studenti il corso sarà svolto in inglese.

Contenuti (Dipl.Sup.) Lo studente acquisirà competenze di chimica bioorganica per interrogare, con approccio molecolare, le funzioni biochimiche e influenzare i processi biologici fondamentali. L'approccio multidisciplinare sarà presentato mediante strategie di sintesi di peptidi e proteine portanti modificazioni co- e post-traduzionali, come molecole chiave coinvolte in eventi di riconoscimento tra cellule e porterà a comprendere le problematiche fondamentali all'interfaccia tra chimica e biologia.

Testi di riferimento Materiale elettronico e articoli scientifici saranno forniti dal docente.

Obiettivi formativi Il corso ha lo scopo di introdurre lo studente alla chimica bioorganica di frontiera, enfatizzando le applicazioni di un approccio molecolare per interrogare le funzioni biochimiche e influenzare i processi biologici fondamentali. Sarà affrontato un approccio multidisciplinare che coinvolge strategie di sintesi di peptidi e proteine portanti modificazioni co- e post-traduzionali, come molecole chiave coinvolte in eventi di riconoscimento tra cellule e cercare di comprendere le problematiche fondamentali all'interfaccia tra chimica e biologia.

Prerequisiti Corsi vincolanti: Chimica Organica I e Chimica Organica II
Corsi raccomandati: Chimica delle Biomolecole

Metodi didattici Presentazioni con supporto di diapositive. Sistemi di didattica inversa. Scambio di materiale tramite Google Drive condiviso.

| | |
|--|---|
| Altre informazioni | Nel caso di lockdown, il corso sarà erogato via Google Meet. |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | <p>Prove in itinere</p> <p>a) Lettura di 4 articoli scientifici selezionati per ogni tematica affrontata nel corso delle lezioni frontali. Lo studente dovrà elaborare una presentazione su formato elettronico per ogni articolo da presentare in aula.</p> <p>b) Attività in laboratorio per apprendere:</p> <p>i) le modalità di sintesi e caratterizzazione di peptidi e/o proteine quali materiali per la nutraceutica e la cosmeceutica, per lo sviluppo di farmaci e diagnostici.</p> <p>c) Prova intermedia pratica o virtuale</p> <p>Esame finale orale Lo studente dovrà rispondere alle domande inerenti il programma svolto nell'ambito del corso.</p> |
| Programma esteso | <p>Principi chimici e strutturali Definizioni e principali caratteristiche conformazionali del legame peptidico. Building block. Classificazione e nomenclatura. Analisi della struttura covalente dei peptidi e proteine. Struttura tridimensionale. Metodi di analisi strutturale. Peptidi biologicamente attivi Prevalenza e ruolo biologico. Biosintesi. Selezione di famiglie di peptidi bioattivi. Sintesi peptidica Principi e obiettivi. Protezione dei gruppi funzionali. Formazione del legame peptidico. Racemizzazione nel corso della sintesi. Sintesi di peptidi su fase solida. Sintesi biochimica. Concetti sulla sintesi di peptidi e proteine Strategie e tattiche. Sintesi in soluzione. Ottimizzazione di strategie su supporti polimerici. Ligation di frammenti peptidici non protetti. Sintesi di sequenze speciali e coniugati peptidici Ciclopeptidi. Peptidi contenenti cistina. Glicopeptidi. Fosfopeptidi. Lipopeptidi. Peptidi solfati. Design di peptidi e proteine, pseudopeptidi, peptidomimetici Design di peptidi. Peptidi modificati. Peptidomimetici. Macropeptidi e de novo design di peptidi e proteine. Sintesi combinatoriale Sintesi parallela. Sintesi di miscele. Applicazioni industriali di peptidi e proteine nel campo della nutraceutica e della cosmeceutica Peptidi come farmaci. Peptidi come diagnostici. Nuovi test diagnostici basati su peptidi.</p> |



Testi in inglese

| | |
|--|--|
| | Italian and if required by all the students the course will be delivered in English |
| | The student will acquire intellectual tools of bioorganic chemistry to investigate by a molecular approach, biochemical functions in order to influence biological processes. The multidisciplinary approach will be presented by synthetic strategies of peptides and proteins bearing co- and post-translational modifications as key molecules in cell-cell recognition events leading to understand fundamental problems at the interface between chemistry and biology. |
| | The teacher will provide electronic material and scientific articles. |

The course has the target to introduce students to advances in the field of contemporary bioorganic chemistry, i.e., chemical biology, emphasizing the application of chemical approaches to interrogate biochemical functions and influence fundamental biological processes. A multidisciplinary approach, involving synthetic strategies to peptides and proteins co- or post-translationally modified, as key molecules involved in cell-cell recognition events, will be addressed to understand fundamental problems at the interface of chemistry and biology.

Courses required: Organic Chemistry I and Organic Chemistry II

Courses recommended: Chemistry of Biomolecules

Presentations based on slides. Instructional strategy based on flipped classrooms. Exchange of material via Google Drive.

In case of lockdown the course will be delivered online via Google Meet.

Intermediate tests

a) Four scientific articles will be selected from the literature for each subject afforded during the frontal lessons. The student shall prepare a power point presentation to discuss the subjects in the context of the class.

b) Laboratory activity to learn the following techniques:

i) synthesis and characterisation of peptide and/or protein materials for nutraceuticals, cosmeceuticals, drug and diagnostics development

c) Intermediate test with a practical or virtual activity

Final oral examination: the student will be asked to answer questions on the subjects afforded during the course.

Fundamental chemical and structural principles

Definitions and main conformational features of the peptide bond. Building blocks. Classification and nomenclature. Analysis of the covalent structure of peptides and proteins. Three-dimensional structure. Methods of structural analysis.

Biologically active peptides

Occurrence and biological roles. Biosynthesis. Selected bioactive peptide families.

Peptide Synthesis

Principles and objectives. Protection of functional groups. Peptide bond formation. Racemisation during synthesis. Solid Phase Peptide Synthesis.

Biochemical synthesis

Synthesis concepts for peptides and proteins

Strategy and tactics. Synthesis in solution. Optimised strategies on polymeric support. Ligation of unprotected peptide segments.

Synthesis of special peptides and peptide conjugates

Cyclopeptides. Cystine peptides. Glycopeptides. Phosphopeptides.

Lipopeptides. Sulfated peptides.

Peptide and protein design, pseudopeptides, peptidomimetics

Peptide design. Modified peptides. Peptidomimetics. Macropeptides and de novo design of peptides and proteins.

Combinatorial synthesis

Parallel synthesis. Synthesis of mixtures.

Industrial application of peptides and proteins in nutraceutical and cosmeceutical sciences.

Peptide drugs. Peptide-based diagnostics. New peptide-based diagnostic assays.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **GIOMI DONATELLA** **Matricola: 090511**

Docente **GIOMI DONATELLA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B012915 - CHIMICA DEI COMPOSTI ETEROCICLICI**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2019**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/06**

Tipo Attività: **C - Affine/Integrativa**

Anno corso: **2**

Periodo: **Secondo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|--|
| Lingua insegnamento | Italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Classificazione e nomenclatura dei composti eterociclici. Eterocicli aromatici: sistemi penta- e esa-atomici mononucleari e benzocondensati. Criteri di valutazione dell'aromaticità. Reattività e tautomeria. Eterocicli non aromatici. Metodi di sintesi: reazioni di ciclizzazione e reazioni pericicliche. Eterocicli penta- e esa-atomici mononucleari e benzocondensati, con uno o due eteroatomi: sintesi, reattività e applicazioni sintetiche. Eterocicli tri-, tetra- e epta-atomici. |
| Testi di riferimento | T. L. Gilchrist: Heterocyclic Chemistry Third Edition (o più recente) Longman |
| Obiettivi formativi | <ul style="list-style-type: none">•Conoscenza e comprensione.•Capacità di applicare conoscenza e comprensione. Lo scopo del corso è quello di fornire agli studenti una conoscenza di base della chimica dei composti eterociclici e una panoramica delle innumerevoli applicazioni di tali composti sia in ambito sintetico che biologico e farmacologico. |
| Prerequisiti | Insegnamenti contenenti i prerequisiti (vincolanti e/o consigliati) Corsi vincolanti: nessuno Corsi raccomandati: nessuno |
| Metodi didattici | Lezioni frontali: 48 ore |

Modalità di verifica dell'apprendimento

Prova finale di esame: orale.
Verrà valutata la comprensione degli argomenti trattati, la capacità di ragionamento critico, la qualità dell'esposizione.
Sono previsti almeno 8 appelli annuali, con numerose sessioni nei mesi di febbraio, giugno, luglio e settembre.
Per sostenere l'esame è richiesta l'iscrizione on line sul sito web della didattica abilitato alla verbalizzazione elettronica. La lista viene chiusa due giorni prima della data di appello. In base al numero di persone registrate potrà essere predisposto un calendario di date possibili, comunicato all'inizio dell'esame.
Il calendario di esami è disponibile al link:
<https://sol.unifi.it/docprenot/docprenot>

Programma esteso

Classificazione e nomenclatura dei composti eterociclici. Eterocicli aromatici: sistemi penta- e esa-atomici mononucleari e benzocondensati. Criteri di valutazione dell'aromaticità: lunghezze di legame, corrente di anello, energie di risonanza. Reattività e tautomeria. Eterocicli non aromatici: strain e proprietà chimiche e chimico-fisiche, analisi conformazionale. Metodi di sintesi: reazioni di ciclizzazione (classificazione di Baldwin) e reazioni pericicliche (cicloaddizioni 1,3-dipolari, Etero Diels-Alder e [2+2], reazioni chelotropiche e elettrocicliche). Eterocicli esaatomici con un eteroatomo (piridina, chinolina, isochinolina): sintesi, reattività e applicazioni sintetiche. Eterocicli pentaatomici con un eteroatomo (pirrolo, indolo, furano, tiofene): sintesi, reattività e applicazioni sintetiche. Caratteristiche generali e applicazioni di eterocicli esa- e penta-atomici con due o più eteroatomi e eterocicli tri-, tetra- e epta-atomici.



Testi in inglese

| | |
|--|--|
| | Italian |
| | Classification and nomenclature of heterocyclic compounds. Aromatic heterocycles: five-atom and six-atom six--electron systems and benzo-fused ring systems. Criteria of aromaticity. Reactivity and tautomerism. Non-aromatic heterocycles. Ring synthesis: cyclization reactions and pericyclic reactions. Five- and six-membered ring systems with one or two heteroatoms and benzo-fused derivatives: synthesis, reactivity, and synthetic applications. Three-, four-, and seven-membered heterocycles. |
| | T. L. Gilchrist: Heterocyclic Chemistry Third Edition (or more recent) Longman |
| | <ul style="list-style-type: none">• Knowledge and comprehension.• Ability to apply knowledge and comprehension. The course is aimed to provide the students with a basic knowledge of heterocyclic chemistry and a general view of their numberless applications in synthetic, biological, and pharmaceutical domains. |
| | Courses to be used as requirements (required and/or recommended) Required courses: none Recommended courses: none |
| | Frontal lectures: 48 hours |
| | Oral final examination. Assessment of the comprehension of the treated subjects, ability of critical reasoning, quality of the presentation. There are at least 8 examination sessions, especially in February, June, July, and September. |

Registration on line is necessary to take the examination. The exam sessions are available at the link: <https://sol.unifi.it/docprenot/docprenot>

Classification and nomenclature of heterocyclic compounds. Aromatic heterocycles: five-atom and six-atom six-electron systems and benzo-fused ring systems. Criteria of aromaticity: bond lengths, ring currents, resonance energies. Reactivity and tautomerism. Non-aromatic heterocycles: bond angle strain, torsional energy barriers, conformational analysis. Ring synthesis: cyclization reactions (Baldwin's classification) and pericyclic reactions (1,3-dipolar cycloadditions, Hetero Diels-Alder and [2+2] cycloadditions, cheletropic reactions, electrocyclic reactions). Six-membered ring systems with one heteroatom (pyridine, quinoline, isoquinoline): synthesis, reactivity, and synthetic applications. Five-membered ring systems with one heteroatom (pyrrole, indole, furan, thiophene): synthesis, reactivity, and synthetic applications. General features and applications of six- and five-membered ring systems with two or more heteroatoms. General features and applications of three-, four-, and seven-membered heterocycles.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **ROSATO ANTONIO** **Matricola: 097825**

Docente **ROSATO ANTONIO, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B012871 - CHIMICA DEI PROCESSI DI BIODEGRADAZIONE**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/03**

Tipo Attività: **B - Caratterizzante**

Anno corso: **1**

Periodo: **Primo Semestre**

Testi in italiano

Lingua insegnamento italiano

Contenuti (Dipl.Sup.) Il corso fornisce una comprensione generale dei processi metabolici dei microorganismi, e una comprensione approfondita dei processi rilevanti per la biodegradazione e biorimediazione di inquinanti organici e inorganici. Sono forniti esempi di applicazioni reali.

Testi di riferimento MICROBIOLOGIA AMBIENTALE a cura di P. Barbieri, G. Bestetti, E. Galli, D. Zannoni, CEA 2008.

BIOLOGIA DEI MICRORGANISMI - Microbiologia ambientale, biomedica e industriale, M. T. Madigan, J. M. Martinko, J. Parker.

Obiettivi formativi Conoscenza dei processi metabolici di base nei microorganismi, in particolare quelli che coinvolgono ioni metallici. Conoscenza dei concetti di base relativi alla regolazione dei processi metabolici in funzione delle condizioni ambientali. Familiarizzazione con le metodiche principali per l'identificazione e il monitoraggio ambientale dei microorganismi. Conoscenza degli aspetti legati all'uso di microorganismi in processi industriali e interventi ambientali. Processi biochimici alla base del metabolismo e della biorimediazione degli idrocarburi. Comprensione dei processi di biodegradazione e biorecupero, relativamente sia agli ioni metallici sia agli idrocarburi. Comprensione dei fattori rilevanti per le applicazioni di tipo ambientale e industriale. Identificare i processi biodegradativi rilevanti per l'interazione dei microorganismi con determinati substrati, e i relativi requisiti per l'eventuale sfruttamento.

Prerequisiti Corsi vincolanti: nessuno

Corsi raccomandati: nessuno

| | |
|--|--|
| Metodi didattici | Lezioni frontali. Numero di ore relative alle attività in aula: 48 |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | <p>L'esame prevede il superamento di una singola prova orale. La prova orale verte su domande relative ai temi trattati a lezione. Per la parte relativa ai processi aerobici è richiesta la conoscenza dei meccanismi di attivazione dell'ossigeno molecolare, dei processi di mono- e diossigenazione, del compostaggio. Per la parte relativa al biorecupero è richiesta la conoscenza dei metodi di biostimolazione, di biomonitoraggio, di identificazione di microrganismi biodegradatori, dei processi di dealogenazione e della tecnica della directed evolution. Per la parte inerente i processi anaerobici, è richiesta la conoscenza dei processi di respirazione anaerobica, fermentazione, metanogenesi, biodegradazione di composti aromatici. Per la parte di interazioni con gli ioni metallici, è richiesta la conoscenza dei principali meccanismi di resistenza e in dettaglio dei meccanismi di resistenza ad As, Hg e Cu, dei meccanismi di regolazione di uptake ed efflusso degli ioni metallici.</p> <p>Per sostenere la prova è richiesta l'iscrizione all'esame sul sito web della didattica abilitato alla verbalizzazione elettronica. La lista viene chiusa due giorni prima della data di appello. In funzione del numero di persone che si sono registrate all'appello potrà essere predisposto un calendario di date possibili, comunicato all'inizio dell'esame.</p> <p>Il calendario di esami per l'a.a. 2017/2018 è disponibile al link: https://sol.unifi.it/docprenot/docprenot</p> <p>Commissione di esame: A. Rosato, R. Pierattelli, P. Turano, S. Ciofi-Baffoni</p> |
| Programma esteso | Classificazione degli organismi viventi. Struttura della cellula. La membrana cellulare. Il metabolismo cellulare. Fonti di energia. La metanogenesi. La sintrofia. Il compostaggio. Monossigenasi, Diossigenasi. Degradazione anaerobica di composti aromatici. La regolazione dell'espressione. Directed evolution. Il biomonitoraggio. Biorimediazione. Inquinamento da metalli pesanti. Interazione microrganismi-metalli pesanti. Meccanismi di resistenza ai metalli pesanti. Biodegradazione della lignina. La bioplastica. La biodepurazione delle acque. La potabilizzazione delle acque. Gli antibiotici. |



Testi in inglese

| | |
|--|---|
| | Italian |
| | The course provides a general understanding of metabolic processes in microorganisms and a detailed understanding of the processes relevant for biodegradation and bioremediation of organic and inorganic pollutants. Examples of applications in industrial/environmental settings are given. |
| | MICROBIOLOGIA AMBIENTALE a cura di P. Barbieri, G. Bestetti, E. Galli, D. Zannoni, CEA 2008. |
| | BIOLOGIA DEI MICRORGANISMI - Microbiologia ambientale, biomedica e industriale, M. T. Madigan, J. M. Martinko, J. Parker. |
| | Knowledge on the fundamental metabolic processes in microorganisms, including those that involve metal ions. Basic knowledge of the regulation of metabolism as a function of environmental conditions. Identification and monitoring of microorganisms. Knowledge of the use of microorganisms in industrial and environmental settings. Biochemical processes underlying the metabolism and the bioremediation of hydrocarbons. Understanding of the processes of biodegradation and bioremediation, addressing both metal ions and hydrocarbons. Comprehension of the parameters that are relevant for environmental |

and industrial applications. Capability to identify the biodegradation processes that are relevant for the interaction of microorganisms with the substrates of interest, and the associated requisites for their exploitation.

Courses required: none

Courses recommended: none

Frontal teaching. Total number of hours for Lectures (hours): 48

Oral exams, at least 8 sessions per year.

In the oral exam, all topics discussed in class will be addressed.

The classification of living organisms. Cell structure. Membrane structure. Cell metabolism. The sources of energy. Methanogenesis. Sintrophy. Monooxygenases. Dioxygenases. Aerobic degradation of aromatic compounds. The regulation of expression. Directed evolution. Bioremediation. Biomonitoring. Heavy metals as pollutants. The interaction between microorganisms and heavy metals. Microbial resistance to heavy metals. The biodegradation of lignin. Bioplastics. Water biodepuration. Water potabilization. Antibiotics.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **PAPINI ANNA MARIA** **Matricola: 092993**

Docente **PAPINI ANNA MARIA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B012715 - CHIMICA DELLE BIOMOLECOLE**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/06**

Tipo Attività: **B - Caratterizzante**

Anno corso: **1**

Periodo: **Primo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|---|
| Lingua insegnamento | Italiano e se richiesto dagli studenti, il corso sarà svolto in inglese |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Lo studente acquisirà gli strumenti per interpretare in modo critico la correlazione tra struttura delle molecole (farmaci e xenobiotici) che interagiscono con i sistemi biologici e proprietà bioattive. Studiando le interazioni di queste molecole con acidi nucleici, amminoacidi e loro modificazioni, peptidi, proteine, carboidrati, lipidi e analizzando articoli scientifici e libri di testo della chimica farmaceutica saranno studiati i meccanismi di scatenamento di condizioni patologiche. |
| Testi di riferimento | Materiale elettronico e articoli scientifici saranno forniti dal docente. |
| Obiettivi formativi | Competenze acquisite: Molecole organiche implicate nei processi biologici. Capacità acquisite al termine del corso: Basi molecolari per la futura comprensione dei processi di chimica biologica e bioorganica. |
| Prerequisiti | Corsi raccomandati: Chimica generale e inorganica e Laboratorio di Chimica Generale ed Inorganica, Chimica Organica I e II e Laboratorio di Chimica Organica I e II. |
| Metodi didattici | Presentazioni con supporto di diapositive. Sistemi di didattica inversa. Scambio di materiale tramite Google Drive. |
| Altre informazioni | Nel caso di lockdown, il corso sarà erogato via Google Meet. |

Modalità di verifica dell'apprendimento

Prove in itinere

a) Lettura di 4 articoli scientifici selezionati per ogni tematica affrontata nel corso delle lezioni frontali. Lo studente dovrà elaborare una presentazione su formato elettronico per ogni articolo da presentare in aula.

b) Attività di laboratorio in presenza o virtuale per apprendere:

i) le modalità di caratterizzazione di biomolecole (farmaco e/o xenobiotico) in fluidi biologici

ii) stabilità di un farmaco in fluidi biologici.

Esame finale orale

Lo studente dovrà rispondere alle domande inerenti il programma svolto nell'ambito del corso.

Programma esteso

La biomolecola vista dal punto di vista del farmaco e dello xenobiotico. Ruolo delle proprietà chimico-fisiche e delle caratteristiche strutturali nell'attività biologica. Concetto di peptidomimetico, selezione e uso di scaffold molecolari. Legami chimici coinvolti nell'azione dei principi attivi dei farmaci, ma anche degli xenobiotici (allergeni, cosmetici, inquinanti, ecc.). Principi di farmacocinetica nei meccanismi di azione. Vie di distribuzione e modelli teorici per il design di molecole bioattive. Estensione del concetto di farmacocinetica e farmacodinamica all'interazione di xenobiotici con i sistemi biologici. Composizione chimica delle barriere biologiche al fine del passaggio delle biomolecole e meccanismi coinvolti nel loro metabolismo. Profarmaci e pro-xenobiotici. Strategie per l'incremento della biodisponibilità e meccanismi di trasporto. Uso di macromolecole quali gli anticorpi e loro caratteristiche molecolari. Inibitori enzimatici. Farmaci antiinfiammatori non steroidei e metodologie per effettuare studi di correlazione struttura-attività: molecole coinvolte nei meccanismi del dolore. Recettori e loro caratterizzazione molecolare per la comprensione dei meccanismi della bioattività. Oppioidi e chemioterapici. Gli studenti effettueranno esperienze di laboratorio anche virtuali correlate ai principali argomenti del corso.



Testi in inglese

Italian and if required by the students the course will be held in English

The student will acquire intellectual tools fundamental to reach a critical knowledge of biologically relevant structures (drugs and xenobiotics) and their SARs properties. In particular the student will investigate the interaction of bioorganic molecules with nucleic acids, amino acids and their co- and post-translational modifications, carbohydrates, lipids by seminal papers of medicinal chemistry, to understand the molecular mechanisms of some relevant pathological conditions.

The teacher will provide electronic material and scientific articles.

Competences acquired: Organic molecules involved in biological processes.

Skills acquired (at the end of the course): Molecular basis for the future understanding of processes of chemical biology and bioorganic chemistry.

Courses recommended: General and Inorganic Chemistry and General and Inorganic Chemistry Laboratory, Organic Chemistry I and II and Organic Chemistry Laboratory I and II.

Presentations based on slides. Instructional strategy based on flipped classrooms. Exchange of material via Google Drive.

In case of lockdown the course will be performed online via Google Meet.

Intermediate tests

a) Four scientific articles will be selected from the literature for each subject afforded during the frontal lessons. The student shall prepare a power point presentation to discuss the subjects in the context of the class.

b) Laboratory activity also virtual to learn the following techniques:

i) to characterise biomolecules (drugs and/or xenobiotics) in biological fluids

ii) to test the stability of a drug in biological fluids.

Final oral examination: the student will be asked to answer questions on the subjects afforded during the course.

Extensive concept of biomolecule: the point of view of drugs and xenobiotics. Role of physico-chemical and structural properties in bioactivity. Concept of peptido-mimetic molecule, selection and use of molecular scaffolds. Chemical bonds involved in the mechanism of action of active ingredients, i.e., pharmaceuticals and xenobiotics (allergens, cosmetics, pollutants, etc.). Role of pharmacokinetics in the mechanism of action of a biomolecule. Distribution pathways and theoretical models to design bioactive molecules. Extension of the concept of pharmacokinetics and pharmacodynamics to the interaction of xenobiotics with biological systems. Chemicals in biological barriers favouring biomolecules transfer. Metabolism. Prodrugs and pro-xenobiotics. Strategies to increase bioavailability and transport mechanisms. Use of macromolecules, i.e., antibodies and their molecular characteristics. Enzymatic inhibitors. Non-steroidal antiinflammatory drugs and structure-activity relationship studies: molecules involved in pain. Molecular characterisation of receptors to investigate bioactivity. Opioids and chemiotherapeutics. The students will have the opportunity to perform practical tutorials also virtual based on the knowledge acquired during the theoretical classes.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **BRANDI ALBERTO** **Matricola: 070164**

Docente **BRANDI ALBERTO, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B012695 - CHIMICA DELLE SOSTANZE ORGANICHE NATURALI**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/06**

Tipo Attività: **B - Caratterizzante**

Anno corso: **1**

Periodo: **Primo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|--|--|
| Lingua insegnamento | italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | I prodotti naturali del metabolismo secondario. I mattoni biosintetici e le vie biogenetiche. La via dell'acetato: i polichetidi. La via del Mevalonato: Terpeni e Steroidi. La via dello Shikimato. Alcaloidi. Antibiotici beta-lattamici. |
| Testi di riferimento | P. M. Dewick Chimica biosintesi e bioattività delle sostanze naturali Edizione italiana Piccin 2001 |
| Obiettivi formativi | L'acquisizione da parte dello studente della conoscenza dei processi biosintetici che conducono alla sintesi dei prodotti naturali, e della struttura e delle proprietà delle più importanti classi dei prodotti naturali |
| Prerequisiti | Corsi di Chimica organica I e II di una laurea triennale in Chimica |
| Metodi didattici | Lezioni teoriche con la proiezione di diapositive e l'ausilio di esercitazioni alla lavagna |
| Altre informazioni | Dispense e diapositive del corso sono disponibili sulla piattaforma Moodle |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | L'apprendimento verrà verificato attraverso un esame orale in cui lo studente dovrà dimostrare di aver conoscenza dei processi biosintetici che conducono alla sintesi dei prodotti naturali e sufficiente capacità logica per correlare i diversi argomenti |

Programma esteso

I prodotti naturali del metabolismo secondario. I mattoni biosintetici e le vie biogenetiche. La via dell'acetato: i polichetidi (Acidi grassi, Prostaglandine, Polichetidi aromatici, Tetracicline, Macrolidi e polieteri). La via del Mevalonato: Terpeni e Steroidi (emi-, mono-, sesqui-, di-, tri-, e tetraterpeni, Steroidi, Colesterolo, Saponine, Fitosteroli, vitamine del gruppo D, Cortisone, ormoni sessuali). La via dello Shikimato (acidi Cinnamici, Lignani e Lignina, Fenilpropani e acidi Benzoici, Cumarine, Flavonoidi). Alcaloidi (da Ornitina e Lisina, alc. pirrolizidinici, piperidinici, chinolizidinici, e indolizidinici, da acido Nicotinico, Tirosina, e Triptofano, Purinici). Antibiotici beta-lattamici (penicilline, cefalosporine).



Testi in inglese

| | |
|--|--|
| | italian |
| | Natural products of secondary metabolism. Biosynthetic building blocks and biogenetic pathways. The acetate pathway: polyketides. Mevalonic acid pathway: Terpenes and Steroids. The Shikimic acid pathways. Alkaloids. Beta-Lactam antibiotics. |
| | P. M. Dewick Chimica biosintesi e bioattività delle sostanze naturali Edizione italiana Piccin 2001 |
| | The acquisition by the student of the knowledge of the biosynthetic processes leading to the synthesis of natural products, and of the structure and properties of the most important classes of natural products |
| | Organic Chemistry I and II courses of a three year degree in Chemistry |
| | Theoretical lessons with the projection of slides and the execution of exercises on the blackboard |
| | Handouts and slides of the course are available on the Moodle platform |
| | Learning will be verified through an oral examination in which the student will have to demonstrate knowledge of the biosynthetic processes leading to the synthesis of natural products and sufficient logical ability to correlate the different topics |
| | Natural products of secondary metabolism. Biosynthetic building blocks and biogenetic pathways. The acetate pathway: polyketides (fatty acids, prostaglandins, aromatic polyketides, tetracyclines, macrolides and polyethers). Mevalonic acid pathway: Terpenes and Steroids (hemi-, mono-, sesqui-, di-, tri-, and tetraterpenes, Steroids, Cholesterol, Saponines, Phytosterols, group D vitamins, Cortisone, sex hormones). The Shikimic acid pathways (cinnamic acids, lignans and lignine, phenylpropanes and benzoic acids, coumarins, flavonoids). Alkaloids (from ornithine and lysine, pyrrolizidine, piperidine, quinolizidine, and indolizidine alk., from nicotinic acid, tyrosine, and tryptophan, purine). Beta-Lactam antibiotics (penicillins, cephalosporins). |

Testi del Syllabus

Resp. Did. **PIETRAPERZIA GIANGAETANO** Matricola: **098971**

Docente **PIETRAPERZIA GIANGAETANO, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B012873 - CHIMICA FISICA AMBIENTALE**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2019**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/02**

Tipo Attività: **C - Affine/Integrativa**

Anno corso: **2**

Periodo: **Secondo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|---|
| Lingua insegnamento | Italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Richiami di dinamica dei fluidi. Struttura, circolazione e dinamica dell'atmosfera. Equilibrio radiativo. Distribuzione dell'energia. Il clima. Effetto serra. Ozono stratosferico. Diffusione, conducibilità termica. Ciclo idrogeologico. Proprietà dell'acqua. Proprietà solventi e anomalie. Proprietà delle soluzioni. Stratificazione termica e turn-over convettivo. Correnti oceaniche. El Niño. Acidificazione degli oceani. |
| Testi di riferimento | A.A. Tsonis, "An introduction to atmospheric thermodynamics" - Cambridge Univ. Press M.J. Jacobson, "Fundamentals of atmospheric modeling" - Cambridge Univ. Press D. J. Jacob "Introduction to atmospheric chemistry" - Princeton University Press S. Emerson, J. Hedges, "Chemical Oceanography and the Marine Carbon Cycle" - Cambridge Univ. Press R. Stewart, "Introduction to Physical Oceanography" |
| Obiettivi formativi | Applicazione dei concetti chiave della Chimica Fisica relativamente alla descrizione dei meccanismi che coinvolgono i sistemi ambientali, in particolare l'atmosfera e l'idrosfera. |
| Prerequisiti | Corsi vincolanti: nessuno Corsi raccomandati: nessuno |
| Metodi didattici | Numero di ore relative alle attività in aula: 48 |

| | |
|--|---|
| Modalità di verifica dell'apprendimento | esame orale |
| Programma esteso | <p>Dinamica dei fluidi: legge di Stevino, principio di Archimede, legge di Bernoulli. Struttura e composizione dell'atmosfera. Effetto del campo magnetico terrestre. Circolazione a bassa e ad alta quota. Celle di circolazione. Dinamica dell'atmosfera. Venti. Effetti della forza di Coriolis. Flusso ciclostrofico e geostrofico. Termodinamica dell'atmosfera. Bilancio energetico della Terra. Temperatura di equilibrio radiativo della Terra. Distribuzione dell'energia sul pianeta. Definizione e tipi di clima. Variazioni climatiche e fattori che influenzano il clima su scala astronomica e planetaria. Meccanismo dell'effetto serra. Effetto degli inquinanti. Riscaldamento globale. Ozono stratosferico: ciclo di Chapman e effetto degli inquinanti. Diffusione: definizione, leggi di Fick, trasporto degli inquinanti. Conducibilità termica: definizione, importanza ai fini ambientali.</p> <p>Distribuzione e tipi di acqua sul pianeta. Ciclo idrogeologico. Proprietà chimico-fisiche dell'acqua. Anomalie dovute al legame a idrogeno. Proprietà solventi. Stratificazione termica e turn-over convettivo. Gli oceani. Struttura e composizione. Proprietà chimico-fisiche dell'acqua di mare. Correnti oceaniche. La pompa di Ekman. El Niño: descrizione e meccanismi. L'acidificazione degli oceani.</p> |

Testi in inglese

| | |
|--|---|
| | Italian |
| | Fundamentals of dynamics of fluids. Structure, circulation and dynamics in the atmosphere. Radiative equilibrium. Energy distribution. The climate. Greenhouse effect. Stratospheric ozone. Diffusion, thermal conductivity. Hydrogeological cycle. Solvent properties and anomalies. Solutions properties. Thermal stratification and convective turn-over. Ocean currents. El Niño. Ocean acidification. |
| | <p>A.A. Tsonis, "An introduction to atmospheric thermodynamics" - Cambridge Univ. Press</p> <p>M.J. Jacobson, "Fundamentals of atmospheric modeling" - Cambridge Univ. Press</p> <p>D. J. Jacob "Introduction to atmospheric chemistry" - Princeton University Press</p> <p>S. Emerson, J. Hedges, "Chemical Oceanography and the Marine Carbon Cycle" - Cambridge Univ. Press</p> <p>R. Stewart, "Introduction to Physical Oceanography"</p> |
| | Physico-chemical key concepts for the description of the processes and mechanisms that involve the environmental systems, in particular the atmosphere and the hydrosphere. |
| | <p>Courses required: none</p> <p>Courses recommended: none</p> |
| | Total number of hours for Lectures (hours): 48 |
| | oral exam |
| | Fluid dynamics: Stevin law, buoyancy, Bernoulli law. Structure and composition of the atmosphere. The Earth magnetic field. Lower and upper atmosphere circulation. Dynamics of the atmosphere. Winds. |

Coriolis acceleration. Cyclostrophic and Geostrophic phenomena. Thermodynamics of the atmosphere. Energy balance of the Earth. Radiative equilibrium temperature. Energy distribution on the Earth. Definition and kinds of climate. Climate variations and factors that affect the climate on the astronomical and planetary scale. Mechanism of the greenhouse effect. Effects of pollution. Global warming. Stratospheric ozone: Chapman cycle and effect of pollution. Diffusion: definition, Fick's laws, transport of polluting agents. Thermal conductivity: definition and relevance for the environment. Distribution and types of water on the planet. Hydrogeological cycle. Physico-chemical properties of water. Anomalies due to the hydrogen bonding. Solvent properties. Thermal stratification and convective turnover. The oceans. Structure and composition. Physico-chemical properties of seawater. Ocean currents. The Ekman pump. El Niño: description and mechanisms. The acidification of the oceans.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **CARDINI GIANNI** **Matricola: 091190**

Docente **CARDINI GIANNI, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B030016 - CHIMICA FISICA DELLO STATO SOLIDO**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2019**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/02**

Tipo Attività: **C - Affine/Integrativa**

Anno corso: **2**

Periodo: **Primo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|--|---|
| Lingua insegnamento | Italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Il corso introduce alcuni aspetti della chimica fisica dello stato solido e in particolare dei cristalli. Gli argomenti principali sono: teorema di Bloch e sue implicazioni, dinamica reticolare e dinamica molecolare. |
| Testi di riferimento | Solid State Physics di Ashcroft Neil W , David Mermin N Cengage Learning, Inc Introduzione alla fisica dello stato solido di Charles Kittel Bollati Boringhieri |
| Obiettivi formativi | Lo studente dovrà prendere confidenza con alcune metodologie teorico computazionali per lo studio di sistemi allo stato solido |
| Prerequisiti | Conoscenze di Chimica Fisica, Fisica e Matematica a livello di L3 in chimica |
| Metodi didattici | Lezioni frontali |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | Discussione di un articolo di chimica fisica dello stato solido |

Programma esteso

Simmetria dei reticoli
Reticolo Diretto e Reciproco
Metalli
Proprietà dello stato fondamentale di un gas di elettroni: proprietà termodinamiche.
Calore specifico a V costante
Conducibilità elettrica e termica

Introduzione al modello di Bloch
Teorema di Bloch
I dimostrazione del teorema di Bloch
II dimostrazione del teorema di Bloch
Interazione debole
Diffrazione
Struttura a bande: esempio monodimensionale

Approssimazione dell'elettrone legato fortemente
Altre approssimazioni per calcolare la struttura a bande dei solidi
Pseudopotenziali
Superficie di Fermi

Proprietà metalliche e bande parzialmente riempite
Massa effettiva

Semiconduttori

Esempio di effetti dovuti alla superficie
Forze di coesione
Dinamica Reticolare
Trattamento classico dei cristalli armonici

catena lineare
Reticolo tridimensionale di Bravais monoatomico
vibrazioni di un cristallo molecolare
Scattering di Neutroni
calore specifico di un cristallo
teoria quantistica dei cristalli armonici
modello di Einstein
modello di Debye
Transizioni dovute a interazione
Interazione elettrone-fotone e elettrone- fonone
Note sulla teoria del funzionale densità
Note sulla dinamica molecolari di cristalli



Testi in inglese

Italian

The course is an introduction to the solid state chemical physics with particular attention to crystals.
The main subjects are:
Bloch theorem and its implications, lattice dynamics and molecular dynamics

Solid State Physics
by Ashcroft Neil W , David Mermin N
Cengage Learning, Inc

Introduzione alla fisica dello stato solido
by Charles Kittel
Bollati Boringhieri

| | |
|--|--|
| | The student should learn some computational and teoretical methods to study solid state systems |
| | Bachelor in Chemistry |
| | lectures |
| | Discussion of a paper on solid state chemical physics |
| | <p>Lattice simmetry direct and reciprocal lattice Metals Groud state of an electron gas: thermodyna mic properties. Specific heat at constant volume. Thermal and electric coducibility Introduction to Bloch theorem Bloch theorem I and II demonstration. Weack interaction Band structure: one dimension example. Tight binding approximation. Other approximation for band structure calculations. Pseudopotentials Fermi surface Metal properties and partially filled bands. Effective mass. Semiconductors Surface effects Intermolecular interactions: models</p> <p>Classical treatment of harmonic crystals Linear chain tridimensional monoatomic Bravais Lattice</p> <p>Molecular crystals lattice dynamics Quantum theory of harmonic crystals</p> <p>Einstein and debye approximations</p> <p>Transitions due to interactions electron-photon and electron-phonon interactions.</p> <p>Notes on DFT Notes on molecular dynamics simulations of crystals</p> |

Testi del Syllabus

Resp. Did. **CAMINATI GABRIELLA** **Matricola: 092205**

Docente **CAMINATI GABRIELLA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B012849 - CHIMICA FISICA DI SISTEMI MOLECOLARI ORDINATI**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/02**

Tipo Attività: **C - Affine/Integrativa**

Anno corso: **1**

Periodo: **Secondo Semestre**



Testi in italiano

Lingua insegnamento

Italiano

Contenuti (Dipl.Sup.)

Il corso fornisce le conoscenze di base della chimica fisica di sistemi molecolari ordinati ed introduce lo studente alla progettazione, realizzazione e caratterizzazione di nanomateriali funzionali ottenuti con moderne metodologie di costruzione molecolare sia da fase vapore che da soluzione. Saranno descritte le principali applicazioni per nanoelettronica, LED, sensori e celle solari. Alcuni dei dispositivi illustrati saranno realizzati e caratterizzati in laboratorio.

Testi di riferimento

Nanoscale Materials, L. M. Liz-Marzán and P. V. Kamat Eds., Kluwer Academic Publishers, New York, 2003.
Nanostructures and Nanomaterials, Synthesis, properties and Application, G. Cao Imperial College Press, London 2004.
Self-Assembly and Nanotechnology, Y. S. Lee, Wiley, New York 2008.

Obiettivi formativi

Il corso si propone di fornire allo studente le conoscenze necessarie per la progettazione, realizzazione e caratterizzazione di nanomateriali funzionali ottenuti con moderne metodologie di costruzione molecolare. Il corso fornisce le conoscenze per la comprensione della chimica fisica di sistemi bidimensionali ordinati ed illustra le principali metodologie per la fabbricazione di nano dispositivi con approccio bottom-up molecolare sia da soluzione (Self-Assembly Mono and Nanolayers, Langmuir-Blodgett and Layer-by-Layer techniques, Supported Lipid Bilayers..) che da fase vapore (Physical Vapo Deposition and Chemical Vapor Deposition). Le conoscenze apprese dallo studente nel precedente percorso Universitario saranno richiamate ed applicate alla comprensione della formazione e indagine strutturale dei sistemi ordinati descritti. Saranno inoltre illustrate le tecniche specifiche di caratterizzazione della struttura, morfologia e funzionalità dei sistemi molecolari ordinati. Verranno presentati esempi di dispositivi molecolari per elettronica e fotonica, display elettroluminescenti, sensori e celle fotovoltaiche. Le competenze acquisite saranno applicate nelle esercitazioni di laboratorio

dove lo studente costruirà e caratterizzerà alcuni dei dispositivi illustrati. Una relazione scritta e orale delle esercitazioni pratiche, o in alternativa di un approfondimento personale, permetterà di verificare la capacità di apprendimento, elaborazione personale e capacità comunicativa dello studente.

| | |
|--|--|
| Prerequisiti | Corsi vincolanti: nessuno Corsi raccomandati: Chimica fisica dei sistemi dispersi e delle interfasi |
| Metodi didattici | Frequenza delle lezioni ed esercitazioni: altamente raccomandata. Per le esercitazioni in laboratorio obbligo di frequenza per almeno il 75 % delle ore Numero di ore totali del corso: 150 Numero di ore per studio personale e altre attività formative di tipo individuale: 100 Numero di ore relative alle attività in aula: 40 Numero di ore relative ad attività di esercitazioni in laboratorio): 6 Numero di ore relative ad attività seminariali: 2 Numero di ore relative ad attività di stage: 0 Numero di ore per prove in itinere: 2 (facoltative) |
| Altre informazioni | Strumenti a supporto della didattica Piattaforma Moodle interattiva con i contenuti del corso |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | Scritto: presentazione di una relazione sulle esperienze di laboratorio o approfondimento personale su "case study" . Orale: discussione sugli argomenti trattati durante il corso o nell'elaborato scritto presentato. |
| Programma esteso | Il corso si propone di introdurre lo studente alla progettazione, realizzazione e caratterizzazione di nanomateriali funzionali ottenuti con moderne metodologie di costruzione molecolare. Il corso fornisce le conoscenze di base della chimica-fisica delle superfici (reali e ideali) e di sistemi bidimensionali organizzati su superfici solide e permette la comprensione dei fenomeni coinvolti nel processo di formazione di materiali ordinati su scala molecolare. Durante il corso saranno illustrate le principali metodologie per la fabbricazione e caratterizzazione di sistemi molecolari organizzati sia per materiali inorganici (silicio e semiconduttori III-V) che per molecole organiche (amfifili, lipidi, polimeri). In particolare, sarà trattata la costruzione di nanodispositivi con approccio bottom-up molecolare sia da soluzione (Self-Assembly of Mono and Nanolayers, Langmuir-Blodgett and Layer-by-Layer techniques, Supported Lipid Bilayers, spin-coating e Doctor Blading) che da fase vapore con tecniche in alto e ultra-alto vuoto come la Physical Vapor Deposition (Sputtering, Molecular Beam Epitaxy) e la Chemical Vapor Deposition (MO-CVD, Atomic Layer Deposition). Saranno illustrate le tecniche di caratterizzazione della struttura, della morfologia ed efficienza di dispositivi molecolari insieme alla descrizione delle moderne tecniche di soft nanolithography per il surface patterning. La parte finale del corso sarà dedicata alla comprensione delle proprietà dei nanosistemi e alla conoscenza del loro ambito applicativo nella moderna nanoelettronica e fotonica, display elettroluminescenti, LED, nanosensori e celle fotovoltaiche di ultima generazione. Alcuni dei dispositivi illustrati (nanosensori, OLED e celle solari di terza generazione) saranno realizzati e caratterizzati in laboratorio. |



Testi in inglese

Italian

Physical-chemistry of organized bidimensional molecular systems. Design, construction and characterization of functional nanodevices obtained with molecular bottom-up approach by means of deposition from vapor phase (PVD, CVD) and from solution. Nano-engineering of bidimensional devices as molecular transistors, light-emitting diodes, photovoltaic cells, nanosensors and biomedical devices.

Nanoscale Materials, L. M. Liz-Marzán and P. V. Kamat Eds., Kluwer Academic Publishers, New York, 2003.

Nanostructures and Nanomaterials, Synthesis, properties and Application, G. Cao Imperial College Press, London 2004.

Self-Assembly and Nanotechnology, Y. S. Lee, Wiley, New York 2008.

The course aims to provide students with the necessary knowledge for the design, implementation and characterization of functional nanomaterials obtained with modern molecular construction methods. The course provides the a detailed understanding of the physical chemistry of ordered two-dimensional systems and illustrates the main methodologies for the fabrication of nanodevices with a bottom-up approach both from solution (Self-Assembly Mono and Nanolayers, Langmuir-Blodgett and Layer-by -Layer techniques, Supported Lipid Bilayers ..) and from the vapor phase (Physical Vapor Deposition and Chemical Vapor Deposition) with vacuum or ultra-high vacuum technologies.

The knowledge learned by the student during the University course will be reviewed and applied to the understanding of the formation and structural investigation of the described ordered systems. The specific techniques implemented for the characterization of the structure, morphology and functionality of the ordered molecular systems will also be illustrated.

Examples of molecular devices for electronics and photonics, electroluminescent displays, sensors and photovoltaic cells will be presented. The acquired skills will be applied in the laboratory where the student will build and characterize some of the illustrated devices.

A written and oral report of, or alternatively of a personal study, will allow the student to demonstrate his/her ability to learn and elaborate the subjects presented in the course as well as his/her communication skills.

Courses required: none

Courses recommended: Physical Chemistry of Interfaces

Attendance at lessons, practice and lab: highly recommended. For the laboratory obligatory attendance at least for 75 % of lab time.

Total hours of the course (including the time spent in attending lectures, seminars, private study, examinations, etc...): 150

Hours reserved to private study and other individual formative activities: 100

Lectures (hours): 40

Hands-on laboratory/practice (hours): 6

Seminars (hours): 2

Intermediate examinations (hours): 2 (optional)

Teaching tools

Interactive Moodle Platform with contents of the course..

Written: presentation of a technical report describing the experiments carried out in the laboratory or presentation of a case study from recent literature.

Oral: discussion on the topics presented during the course and in the written presentation

The course introduces the student to the design, construction and characterization of functional nanodevices obtained with modern nanotechnology. The course provides the physical-chemical basis of organized bidimensional molecular systems on solid surfaces allowing for the understanding of the phenomena underlying the process of formation

of molecularly organized arrays. The course describes the current techniques used for a molecular bottom-up fabrication approach for different molecules spanning from silicon and III-V semiconductors to amphiphiles, lipid and polymers. Nanofabrication from solution (Self-Assembly Monolayers, Langmuir-Blodgett and Layer-by-Layer techniques, Supported Lipid Bilayers, Spin-coating and Doctor Blading) and from the gas phase will be addressed. High and ultra-high vacuum techniques such as Chemical Vapor Deposition (MO-CVD and Atomic Layer Deposition) and Physical Vapor Deposition (Sputtering, Molecular-Beam Epitaxy) will be presented. The principal characterization techniques implemented for ordered molecular systems are reviewed together with Soft Nanolithography for Surface Patterning . Nano-engineering of bidimensional devices, i.e. molecular transistors, light-emitting diodes, photovoltaic cells, nanosensors and biomedical nanodevices will be illustrated together with modern soft nanolithography for surface patterning.

Typical nanodevices (nanosensors, OLED and III generation solar cells) will be prepared and characterized in the laboratory practice.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **GIOMI DONATELLA** **Matricola: 090511**

Docente **GIOMI DONATELLA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B016287 - CHIMICA ORGANICA SUPERIORE**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/06**

Tipo Attività: **B - Caratterizzante**

Anno corso: **1**

Periodo: **Primo Semestre**



Testi in italiano

Lingua insegnamento

Italiano

Contenuti (Dipl.Sup.)

Studio dei meccanismi di reazione in chimica organica. Profili cinetici. Controllo cinetico e termodinamico. Principi meccanicistici. Studi cinetici. Ordine di reazione e molecolarità. Approssimazione dello stato stazionario. Tecniche isotopiche. Effetti cinetici isotopici. Studio di intermedi. Equazione di Hammett. Correlazioni lineari di energia libera e relative deviazioni. Trasposizioni molecolari. Reazioni di eliminazione. Sostituzioni nucleofile alifatiche. Reazioni pericicliche.

Testi di riferimento

Testi di chimica organica di livello avanzato e specialistico.
P. Sykes, A guide book to Mechanism in Organic Chemistry, Longman

F. A. Carey, R. J. Sundberg, Advanced Organic Chemistry, Part A, Kluwer Academic/Plenum Publishers

G.B. Gill, M. R. Willis, Pericyclic Reactions, Chapman and Hall

T. L. Gilchrist, R. C. Storr, Organic Reactions and Orbital Symmetry, Cambridge University Press

I. Fleming, Frontier Orbitals and Organic Chemistry Reactions, Wiley-Interscience

Obiettivi formativi

- Conoscenza e comprensione.
- Capacità di applicare conoscenza e comprensione.

Acquisizione dei concetti di base relativi allo studio dei meccanismi di reazione in chimica organica. Applicazione dei metodi di indagine meccanicistica ad alcune classi di reazioni organiche. Prevedere il meccanismo di alcune reazioni organiche, la natura dei prodotti di reazione, le diverse selettività.

| | |
|--|--|
| Prerequisiti | Insegnamenti contenenti i prerequisiti (vincolanti e/o consigliati) Corsi vincolanti: nessuno Corsi raccomandati: nessuno |
| Metodi didattici | Lezioni frontali: 48 ore |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | È prevista una prova scritta di accertamento in itinere relativa alla prima parte del corso (metodi generali di studio dei meccanismi di reazione), che potrà essere utilizzata come parte dell'esame finale. Prova finale di esame: orale. Verrà valutata la comprensione degli argomenti trattati, la capacità di ragionamento critico, la qualità dell'esposizione. Sono previsti almeno 8 appelli annuali, con numerose sessioni nei mesi di febbraio, giugno, luglio e settembre. Per sostenere l'esame è richiesta l'iscrizione on line sul sito web della didattica abilitato alla verbalizzazione elettronica. La lista viene chiusa due giorni prima della data di appello. In base al numero di persone registrate potrà essere predisposto un calendario di date possibili, comunicato all'inizio dell'esame. Il calendario di esami è disponibile al link: https://sol.unifi.it/docprenot/docprenot |
| Programma esteso | Studio dei meccanismi di reazione in chimica organica. Profili cinetici. Controllo cinetico e termodinamico. Principio della reversibilità microscopica. Postulato di Hammond. Principio di Curtin-Hammett. Studi cinetici. Ordine di reazione e molarità. Approssimazione dello stato stazionario. Tecniche isotopiche. Effetti cinetici isotopici primari e secondari. Studio di intermedi. Equazione di Hammett. Correlazioni lineari di energia libera e relative deviazioni up e down. Studio di alcune classi di reazioni sotto il profilo meccanicistico. Trasposizioni molecolari. Reazioni di eliminazione: classificazione, ipotesi meccanicistiche, fattori che influenzano la reattività, decorso stereochimico, orientamento geometrico e posizionale. Sostituzioni nucleofile al carbonio saturo: processi mono- e bimolecolari, ipotesi delle coppie ioniche. Reazioni pericicliche: definizione e classificazione, studio topologico. Approcci teorici: principio di conservazione della simmetria orbitale e regole di Woodward e Hoffmann, teoria dello stato di transizione aromatico, teoria degli orbitali molecolari di frontiera. Reattività e selettività. Applicazioni sintetiche. |



Testi in inglese

| | |
|--|--|
| | Italian |
| | Investigation of organic reactions mechanism. Reaction energy profiles. Kinetic and thermodynamic control. Hammond's postulate. Curtin-Hammett principle. Kinetic studies. Rate-limiting step. Steady state approximation. Isotopic labelling. Kinetic isotope effects. Reaction intermediates. Linear free energy relationships. Hammett equation. Upwards and downwards deviations. Molecular rearrangements. Elimination reactions. Nucleophilic substitutions. Pericyclic reactions. |
| | Advanced organic chemistry and mechanism investigation textbooks. P. Sykes, A guide book to Mechanism in Organic Chemistry, Longman F. A. Carey, R. J. Sundberg, Advanced Organic Chemistry , Part A, Kluwer Academic/Plenum Publishers G.B. Gill, M. R. Willis, Pericyclic Reactions, Chapman and Hall T. L. Gilchrist, R. C. Storr, Organic Reactions and Orbital Symmetry, |

Cambridge University Press

I. Fleming, *Frontier Orbitals and Organic Chemistry Reactions*, Wiley-Interscience

• Knowledge and comprehension.
• Ability to apply knowledge and comprehension.
Knowledge of the basic concepts for the study of the reaction mechanism in organic chemistry.
Applications of the methods for mechanistic investigation to the study of some classes of organic reactions.
Foreseeing the mechanistic pathway of some organic reactions, the nature of the reaction products and the selectivities.

Courses to be used as requirements (required and/or recommended)

Required courses: none
Recommended courses: none

Frontal lectures: 48 hours

Opportunity for an intermediate written examination on the first part of the course (general methods for organic reactions mechanism investigation) is offered and it may be used as part of the final examination.

Oral final examination.

Assessment of the comprehension of the treated subjects, ability of critical reasoning, quality of the presentation.

There are at least 8 examination sessions, especially in February, June, July, and September.

Registration on line is necessary to take the examination. The exam sessions are available at the link: <https://sol.unifi.it/docprenot/docprenot>

Investigation of organic reactions mechanism. Reaction energy profiles. Kinetic and thermodynamic control. Hammond's postulate. Curtin-Hammett principle. Kinetic studies. Rate-limiting step, reaction order and molecularity. Steady state approximation. Isotopic labelling. Kinetic isotope effects. Reaction intermediates. Linear free energy relationships. Hammett equation. Upwards and downwards deviations. Mechanistic study of some classes of organic reactions. Molecular rearrangements. Elimination processes: classification and mechanistic hypotheses, reactivity, stereochemical outcome, regio- and stereo-selectivities. Nucleophilic substitutions: monomolecular, bimolecular, and borderline mechanisms. The concept of ion pairs. Pericyclic reactions: definition and classification, topology of interactions. Theories of concerted reactions: conservation of orbital symmetry and Woodward and Hoffmann rules, theory of the aromatic transition state, frontier molecular orbitals theory. Reactivity and selectivity. Synthetic applications.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **GOTI ANDREA** **Matricola: 097588**

Docente **GOTI ANDREA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B024521 - CHIMICA ORGANOMETALLICA**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/06**

Tipo Attività: **B - Caratterizzante**

Anno corso: **1**

Periodo: **Primo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|---|
| Lingua insegnamento | Italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Derivati di organozinco ed organomercurio. Derivati organometallici degli elementi di transizione. Scambio di legante, addizione ossidativa, eliminazione riduttiva, inserzione intramolecolare, β -eliminazione, attacco nucleofilo a leganti organici insaturi. Reazioni di complessi σ -alchilici e π alchene, alchino, allile, arene. Reattività di metallo-carbeni di Fischer e di Schrock. |
| Testi di riferimento | L. S. Hegedus, Transition Metals in the Synthesis of Complex Organic Molecules, University Science Books J. Hartwig, Organotransition Metal Chemistry - From Bonding to Catalysis, University Science Books Ch. Elschenbroich, A. Salzer, Organometallics, Cap. 12-15, 17, VCH Publishers J. P. Collman, L. S. Hegedus, J. R. Norton, R. G. Finke, Principles and Applications of Organotransition Metal Chemistry, Cap. 1-2, 4-6, 16-20, University Science Books M. Beller, C. Bolm, Transition Metals for Organic Synthesis, Vol. 1, Cap. 2.7, 2.10, 2.11, 2.13, 2.14, 2.15, 3.1, 3.2, 3.12, 3.13, Wiley-VCH |
| Obiettivi formativi | Acquisizione dei concetti di base relativi alla chimica dei composti organometallici di transizione. Metodologie e procedure nell'utilizzo dei composti organometallici di transizione. Individuazione delle opportunità e delle problematiche connesse con l'applicazione di reazioni che impiegano composti organometallici di transizione nella progettazione di sintesi organiche. |
| Prerequisiti | Insegnamenti contenenti i prerequisiti (vincolanti e/o consigliati) Corsi vincolanti: nessuno |

Corsi raccomandati: nessuno

Metodi didattici

Numero di ore relative alle attività in aula: 48.
Il docente utilizza la lavagna e lucidi relativi agli argomenti trattati che sono disponibili sulla piattaforma Moodle.

Modalità di verifica dell'apprendimento

Prova finale di esame: orale. Sono previsti almeno 8 appelli annuali, con numerose sessioni nei mesi di febbraio, giugno, luglio e settembre.

Programma esteso

Proprietà del legame M-C. Stabilità, decomposizione e manipolazione di composti sensibili. Metodi di purificazione e di analisi dei composti organometallici. Organoderivati di Zn. Preparazione. Reazione con alogenuri acilici e chetoni. Reazione di Noyori. Reazione di Reformatskii. Ciclopropanazione di Simmons-Smith. Ciclopropanazioni enantioselettive. Olefinazione di Takai-Lombardo. Organocadmio: preparazione, uso. Organomercurio: preparazione, struttura, reattività. Utilizzo dei derivati di Hg. Tossicità di sali e composti di Hg. La chimica dei derivati organometallici di transizione. Varietà dei leganti, dei metalli, stati di ossidazione, tipi di legame. Convenzioni e formalismi. Regola dei 18 elettroni e calcolo degli elettroni. Back-bonding e sua influenza su struttura e reattività. Complessi coordinativamente saturi ed insaturi. Complessi metallocarbonilici. Categorie di complessi in relazione alla regola dei 18 elettroni. Complessi polimetallici: calcolo dell'ordine di legame M-M. Reazioni caratteristiche degli organometalli di transizione. Scambio di legante: meccanismi associativo e dissociativo. Addizione ossidativa ed eliminazione riduttiva. Reagenti polari, apolari, insaturi e relativi meccanismi. Formazione di legami C-H e C-C per eliminazione riduttiva. Inserzione intramolecolare o migratoria. Complessi σ -alchilici: β -eliminazione. Preparazione o formazione di complessi σ -alchilici. Derivati di organorame: preparazione e varietà. Organocuprati di Gilman, di ordine superiore, eterocuprati, cianocuprati. Reazioni di coupling con alogenuri organici, epossidi ed alogenuri acilici. Addizione coniugata di cuprati a composti carbonilici α,β -insaturi. Complessi σ di Pd. Formazione "in situ" per addizione ossidativa. Fonti di Pd(0). Leganti fosfinici. Reazione di Heck. Inserzione di CO. Complessi σ -alchilici da idrometallazione: idropalladazione ed idrozirconazione. Cicloisomerizzazione di enini. Reazioni domino Pd-catalizzate. Utilizzo di complessi σ di Zr. Reazioni di cross-coupling per transmetallazione. Organometalli impiegabili nelle reazioni di cross-coupling Pd catalizzate. Reazioni di Kumada, Negishi, Stille, Suzuki. Reazioni di coupling-carbonilazione. Reazione di Sonogashira. Cicloaddizione di azidi ad alchini terminali catalizzata da Cu(I). Formazione di legami C-N e C-O. Reazione di Buchwald-Hartwig. Reazione di Narasaka-Heck. Complessi con leganti π : descrizione del legame. Attacco nucleofilo a polieni coordinati: regole di Davies-Green-Mingos. Complessi organometallici di metalli di transizione come gruppi protettori e come intrappolanti. Reattività di complessi con alcheni. Processo Wacker. Inserzione di CO ed alcheni elettronpoveri negli intermedi σ -alchilici. Reazioni domino e one-pot di formazione di eterocicli azotati via amminocarbonilazione e carboamminazione Pd-catalizzate di complessi intermedi Pd(II)-alchene e ammido-Pd(II). Diamminazione di dieni e trieni coniugati e di alcheni con diaziridinoni catalizzata da Pd(0) e Cu(I). Reazioni catalizzate da complessi di oro. Attivazione di alchini ed alcheni: protodemetallazione, comportamento carbenoide. Reazioni di idroamminazione catalizzate da Au(I) di alcheni, alchini ed alleni. Reazioni di zirconaciclopropani e titanaciclopropani. Zirconocene. Dimerizzazione di alcheni ed alchini e cicloisomerizzazione di enini. Carbomagnesiazione di alcheni catalizzata da zirconocene. Reazione di Kulinkovich. Complessi Co-alchino: struttura. Reazione di Nicholas. Reazione di Pauson-Khand. Ciclotrimerizzazione di alchini. Varianti con alcheni, nitrili, immine, isocianati. Complessi π -alillici: legame, struttura, preparazione. Reattività dei complessi π -alillici. Attacco nucleofilo. Vinilossirani. Accoppiamento con addizioni nucleofile a complessi π -alchene: diacetossilazione e cloroacetossilazione di dieni. Chimica del TMM: cicloaddizioni [3+2]. Metodo di Trost ed aperture di metilene ciclopropani catalizzate da Pd e Ni. Metallo-areni: sintesi e

proprietà. Reattività di complessi (arene)Cr(CO)₃: sostituzione nucleofila, addizione/ossidazione, addizione/protonazione. Ingombro del gruppo Cr(CO)₃: diastereoselettività. Chiralità di complessi arenici orto- e meta-disostituiti: applicazione in sintesi enantioselettive. Le tre categorie di metallo-carbeni. Metallo-carbeni di Fischer: preparazione e proprietà. Reazioni di Dötz e di Hegedus. Carbeni elettrofili non stabilizzati: ciclopropanazione. Metallo-nitreni: aziridinazione di alcheni, inserzione in legami C-H. Carbeni di Schrock. Olefinazione: reattivo di Tebbe, titanaciclobutani, reazione di Petasis. Metatesi degli alcheni: meccanismo di Chauvin. Tipologie delle metatesi di alcheni: CM, RCM, ROM, ROMP, reazioni domino. Catalizzatori impiegati: catalizzatori di Schrock, Grubbs I e II generazione, Herrmann, Hoveyda-Grubbs, supportati, chirali. Metatesi di enini. Metatesi di alchini.



Testi in inglese

| | |
|--|---|
| | Italian |
| | Organozinc and organomercury derivatives. Organotransition metal derivatives. Ligand exchange, oxidative addition, reductive elimination, intramolecular insertion, β -elimination, nucleophilic attack to unsaturated organic ligands. Reactions of σ -alkyl and π alkene, alkyne, allyl, arene complexes. Reactivity of Fischer and Schrock metal carbene complexes. |
| | L. S. Hegedus, Transition Metals in the Synthesis of Complex Organic Molecules, University Science Books J. Hartwig, Organotransition Metal Chemistry - From Bonding to Catalysis, University Science Books Ch. Elschenbroich, A. Salzer, Organometallics, Cap. 12-15, 17, VCH Publishers J. P. Collman, L. S. Hegedus, J. R. Norton, R. G. Finke, Principles and Applications of Organotransition Metal Chemistry, Cap. 1-2, 4-6, 16-20, University Science Books M. Beller, C. Bolm, Transition Metals for Organic Synthesis, Vol. 1, Cap. 2.7, 2.10, 2.11, 2.13, 2.14, 2.15, 3.1, 3.2, 3.12, 3.13, Wiley-VCH |
| | Knowledge of the basic concepts of the chemistry of organotransition metal compounds. Methods and procedures in the use of organotransition metal compounds. |
| | Courses to be used as requirements (required and/or recommended) Courses required: none Courses recommended: none |
| | Hours of frontal teaching: 48. Subjects are explained with the aid of blackboard; a guide is given by projection of transparencies which are available via Moodle. |
| | Final oral examination. At least 8 sessions are programmed, in January, February, June, July, and September. |
| | Properties of the M-C bond. Stability, decomposition and manipulation of organometallic derivatives. Purification and analysis of organometallic derivatives. Organozinc derivatives. Preparation. Reactions with acyl halides and ketones. Noyori reaction. Reformatskii reaction. Simmons-Smith cyclopropanation. Enantioselective cyclopropanations. Takai-Lombardo olefination. Organocadmium derivatives: preparation, use. Organomercury derivatives: preparation, structure, reactivity. Use of organomercurials. Toxicity of Hg salts and compounds. The chemistry of organotransition metal derivatives. Variety of ligands, metals, oxidation states, coordination modes. Conventions and formalisms. 18 electron rule and the electron calculation. Back-bonding: influence on structure and |

reactivity. Coordinatively saturation and unsaturation. Metal carbonyl complexes. Classes of complexes with respect to the 18 electron rule. Polymetallic complexes: M-M bond order calculation. Reactions of organotransition metal complexes. Ligand exchange: associative and dissociative mechanisms. Oxidative addition and reductive elimination. Polar, apolar and unsaturated reagents and their mechanisms. Formation of C-H and C-C bonds by reductive elimination. Intramolecular or migratory insertion. σ -Alkyl complexes: β -elimination. Preparation or formation of σ -organyl complexes. Organocopper derivatives: preparation and variety. Gilman cuprates, higher order cuprates, heterocuprates, cyanocuprates. Coupling reactions with organohalides, epoxides, acyl halides. Conjugate addition to α,β -unsaturated carbonyl derivatives. σ -Organyl Pd complexes: "in situ" formation by oxidative addition. Sources of Pd(0). Phosphine ligands. Heck reaction. CO insertion. σ -Alkyl complexes from hydrometallation: hydropalladation and hydrozirconation. Cycloisomerization of enynes. Pd-catalyzed domino reactions. Use of σ complexes of Zr. Cross-coupling reactions via transmetallation. Available organometallics for Pd-catalyzed cross-coupling reactions. Kumada, Negishi, Stille, Suzuki reactions. Coupling-carbonylation reactions. Sonogashira reaction. Cu(I) catalyzed cycloaddition of azides with terminal alkynes. C-N and C-O bond formation. Buchwald-Hartwig reaction. Narasaka-Heck reaction. Complexes with π ligands: bonding. Nucleophilic addition to metal bound polyenes: Davies-Green-Mingos rules. Organotransition metal complexes used as protecting groups and stabilizing moieties. Reactivity of alkene complexes. The Wacker process. Insertion of CO and electron poor alkenes in σ -alkyl intermediate complexes. Nitrogen heterocycle formation via domino and one-pot Pd-catalyzed aminocarbonylation and carboamination of alkene Pd(II) and amido Pd(II) complexes. Pd(0) and Cu(I) catalyzed diamination of conjugated dienes and trienes and of alkenes with diaziridinones. Reactions catalyzed by gold complexes. Activation of alkynes and alkenes: protodemetalation, carbenoid behavior. Au(I) catalyzed hydroamination reactions of alkenes, alkynes and allenes. Reactions of zirconacyclopropanes and titanacyclopropanes. Zirconocene. Dimerization of alkenes and alkynes and cycloisomerization of enynes. Carbomagnesiation of alkenes catalyzed by zirconocene. Kulinkovich reaction. Co-alkyne complexes: structure. Nicholas reaction. Pauson-Khand reaction. Cyclotrimerization of alkynes. Variants with alkynes, nitriles, imines, isocyanates. π -Allyl complexes: bonding, structure, preparation. Reactivity of π -allyl complexes. Nucleophilic attack. Vinyloxiranes. Combination with nucleophilic addition to π -alkene complexes: diacetoxylation and chloroacetoxylation of dienes. Chemistry of TMM: [3+2] cycloadditions. Trost method and Pd and Ni catalyzed methylenecyclopropanes ring opening. Metal arene complexes: synthesis and properties. Reactivity of (arene)Cr(CO)₃ complexes: nucleophilic substitution, addition/oxidation, addition/protonation. Bulkiness of Cr(CO)₃: diastereoselectivity. Chirality of ortho- and meta-disubstituted arene complexes: application in enantioselective syntheses. The three classes of metal carbene complexes. Fischer metal carbenes: preparation and properties. Dötz and Hegedus reactions. Unstabilized electrophilic carbenes: cyclopropanation. Metal nitrene complexes: aziridination of alkenes, C-H bond insertion. Schrock metal carbene complexes. Olefination: Tebbe reagent, titanacyclobutanes, Petasis reaction. Alkene metathesis: the Chauvin mechanism. Typologies of alkene metatheses: CM, RCM, ROM, ROMP, domino reactions. Catalysts for metathesis: Schrock, Grubbs I and II generation, Herrmann, Hoveyda-Grubbs, supported, chiral catalysts. Metathesis of enynes. Metathesis of alkynes.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **BIANCHI ANTONIO** **Matricola: 088752**

Docente **BIANCHI ANTONIO, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B012853 - CHIMICA SUPRAMOLECOLARE**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/03**

Tipo Attività: **B - Caratterizzante**

Anno corso: **1**

Periodo: **Primo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|---|
| Lingua insegnamento | italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Chimica molecolare e supramolecolare. Molecole ed aggregati supramolecolari. Le forze che governano la formazione degli aggregati supramolecolari. Molecole macrocicliche ed acicliche quali recettori di cationi, anioni e molecole neutre. Aspetti termodinamici e cinetici relativi alle formazioni degli addotti supramolecolari. Struttura delle specie supramolecolari. Relazioni proprietà-struttura e design molecolare. Riconoscimento molecolare. Self-assembly. Reattività e catalisi supramolecolare. |
| Testi di riferimento | Materiale fornito dal docente |
| Obiettivi formativi | Possedere gli elementi fondamentali per la comprensione dei processi di formazione di addotti di specie chimiche (sia molecole che ioni) mutuamente aggregati ed organizzati mediante forze deboli, delle proprietà e della trasformazione di questi addotti, delle caratteristiche del riconoscimento molecolare e del "self-assembly"; conoscere i criteri di base per il design di recettori molecolari e del funzionamento di dispositivi e macchine molecolari. |
| Prerequisiti | Corsi vincolanti: nessuno Corsi raccomandati: nessuno |
| Metodi didattici | Numero di ore relative alle attività in aula: 48 |

| | |
|--|--|
| Modalità di verifica dell'apprendimento | Esame finale orale o, in alternativa, 2 prove scritte in itinere e presentazione orale di una tesina. |
| Programma esteso | Definizione e ambiti di studio di “chimica molecolare” e “chimica supramolecolare”. Molecole ed aggregati supramolecolari. Le forze che governano la formazione di aggregati supramolecolari (interazioni elettrostatiche, di Van der Waals, di dispersione, di stacking, legami a idrogeno, effetto idrofobo). Molecole macrocicliche ed acicliche quali recettori di cationi, anioni e molecole neutre. Aspetti termodinamici e cinetici relativi alle formazione degli addotti supramolecolari. Struttura delle specie supramolecolari. Relazioni proprietà-struttura e design molecolare. Riconoscimento molecolare. Self-assembly e processi di auto-replicazione. Reattività e catalisi supramolecolare. Dispositivi molecolari e macchine molecolari. Sistemi modello bioinorganici e bioorganici. Trasporto attraverso membrane. |



Testi in inglese

| | |
|--|--|
| | italian |
| | Molecular and Supramolecular Chemistry. Forces governing the formation of supramolecular aggregates. Macrocyclic and acyclic receptors for cations, anions and neutral species. Thermodynamic and kinetic aspects in the formation of supramolecular aggregates. Structures of supramolecular species. Molecular recognition. Self-assembly. Supramolecular reactivity and catalysis. Molecular devices and machines. |
| | Material given by the teacher. |
| | Fundamentals for the understanding of: 1) association processes of chemical species (molecules and ions) to form organized aggregates by means of weak forces; 2) aggregates' properties and transformation; 3) molecular recognition 4) design of molecular receptors; 5) self-assembly; 6) molecular devices and machines. |
| | Courses required: none Courses recommended: none |
| | Total number of hours for Lectures (hours): 48 |
| | Final oral examination or, alternatively, 2 written tests during the course and final dissertation. |
| | Molecular and supramolecular chemistry: definitions and fields of study. Molecules and supramolecular aggregates. The forces that govern the formation of supramolecular aggregates (electrostatic interactions, Van der Waals, dispersion, stacking, hydrogen bonds, hydrophobic effect). Acyclic and macrocyclic molecules as receptors for cations, anions and neutral molecules. Thermodynamic and kinetic aspects concerning the formation of supramolecular adducts. Structures of the supramolecular species. Property-structure relation and molecular design. Molecular recognition. Self-assembly and self-replication processes. Reactivity and supramolecular catalysis. Molecular devices and machines. Bioorganic and bioinorganic model systems. Transport through membranes. |

Testi del Syllabus

Resp. Did. **CHELLI RICCARDO** **Matricola: 104965**

Docente **CHELLI RICCARDO, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B012925 - CHIMICA TEORICA**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/02**

Tipo Attività: **B - Caratterizzante**

Anno corso: **1**

Periodo: **Secondo Semestre**



Testi in italiano

Lingua insegnamento

Italiano

Contenuti (Dipl.Sup.)

Stati quantici e complessioni. Insieme microcanonico. Legge di distribuzione Maxwell-Boltzmann. Funzione di partizione. Entropia. Medie d'insieme. Approccio statistico a grandezze termodinamiche. Insieme canonico. Calcolo quanto-meccanico di funzioni di partizione. Calore specifico di gas e solidi. Miscele ideali e regolari. Costanti di equilibrio. Spazio delle fasi. Integrale delle fasi. Statistiche di Bose-Einstein e Fermi-Dirac. Termodinamica di non-equilibrio. Esercitazioni al calcolatore.

Testi di riferimento

Titolo: Statistical Thermodynamics
Autore: Bernard J. McClelland
Casa Editrice: Chapman and Hall, 1973

Titolo: Statistical Thermodynamics
Autore: Normand M. Laurendeau
Casa Editrice: Cambridge University Press, 2005

Titolo: Free Energy Calculations (Theory and Applications in Chemistry and Biology)
Editori: Christophe Chipot, Andrew Pohorille
Springer Series in CHEMICAL PHYSICS (Volume 86 2007)

Obiettivi formativi

Scopo del corso è quello di fornire conoscenze di base di chimica teorica riguardanti concetti fondamentali di meccanica e termodinamica statistica di equilibrio e non equilibrio. In particolare, L'obiettivo è quello di esplorare alcuni aspetti relativi all'intima relazione fra la natura quantistica di un sistema e le sue proprietà termodinamiche, partendo da concetti statistici elementari connessi alla modalità di popolare stati quantistici. Inoltre saranno discusse moderne teorie che forniscono una precisa formulazione statistica del secondo principio della termodinamica. Opzionalmente, sarà possibile svolgere un'esercitazione di programmazione per calcolare proprietà termodinamiche di un sistema

a partire da dati molecolari ottenuti con calcoli di chimica quantistica.

| | |
|--|---|
| Prerequisiti | I concetti appresi nella parte di meccanica statistica del corso di "Chimica Fisica Superiore" (B012815) sono molto utili per una proficua frequenza del corso. |
| Metodi didattici | Lezioni di teoria (5 CFU) saranno accompagnate da esercitazioni al calcolatore (1 CFU). |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | L'esame è orale e consiste nella discussione approfondita di un argomento relativamente vasto trattato a lezione e comunicato allo studente all'incirca 24 prima della discussione. Le esercitazioni al calcolatore, se effettuate, contribuiranno alla valutazione finale. |
| Programma esteso | Stati quantici e complessioni. Concetto di distribuzione e numeri di distribuzione. Permutazioni. Numero di complessioni per un sistema di molecole indipendenti e distinguibili (caso degenere e non degenere). Probabilità di una distribuzione. Insieme microcanonico. Legge di distribuzione Maxwell-Boltzmann. Funzione di partizione molecolare. Valori medi di proprietà molecolari. Interpretazione statistica della temperatura. Entropia. Legge di Boltzmann per l'entropia. Secondo principio della termodinamica. Calcolo di proprietà termodinamiche. Insieme canonico. Medie d'insieme. Ipotesi ergodica. Funzioni di partizione di un sistema macroscopico. Insieme canonico di particelle indipendenti. Fattorizzazione della funzione di partizione molecolare. Legge di Maxwell-Boltzmann per particelle indistinguibili (sistemi gassosi). Funzione di partizione traslazionale. Equazione di stato dei gas perfetti (determinazione della costante di Boltzmann). Fattorizzazione della funzione di partizione interna. Funzioni di partizione nucleare, elettronica, vibrazionale e rotazionale. Calori specifici. Modello di Einstein e teoria di Debye per il calore specifico di un cristallo. Miscele. Entropie di mescolamento di soluzioni solide e liquide ideali e di gas perfetti. Calcolo statistico di costanti di equilibrio. Costanti di equilibrio di sistemi semplici. Spazio delle fasi. Funzione di partizione ed integrale delle fasi Q in un sistema classico. Fattorizzazione di Q nello spazio delle fasi. Calcolo di Q in sistemi classici semplici. Equipartizione dell'energia. Velocità molecolari. Leggi di distribuzione statistica di Bose-Einstein e Fermi-Dirac. Elettroni nei metalli. Gas di bosoni e condensazione di Bose-Einstein. Termodinamica statistica di non-equilibrio. Calcolo di proprietà di equilibrio da grandezze di non-equilibrio. Teorema delle fluttuazioni transienti di Crooks. Uguaglianza di Jarzynski. Formulazione statistica del secondo principio della termodinamica e di teoremi ad esso correlati. Alcuni degli argomenti trattati a lezione saranno oggetto di esercitazioni al calcolatore. |



Testi in inglese

| | |
|--|---|
| | Italian |
| | Quantum states and complexions. Microcanonical ensemble. Maxwell-Boltzmann distribution law. Partition function. Entropy. Ensemble averages. Statistical approach to thermodynamic properties. Canonical ensemble. Quantum-mechanical calculation of partition functions. Specific heat in gases and solids. Ideal and regular mixtures. Equilibrium constants. Phase space. Phase integral. Bose-Einstein and Fermi-Dirac statistical distribution laws. Nonequilibrium thermodynamics. Computer training. |
| | Title: Statistical Thermodynamics Author: Bernard J. McClelland Publisher: Chapman and Hall, 1973 |

Title: Statistical Thermodynamics
Author: Normand M. Laurendeau
Publisher: Cambridge University Press, 2005

Title: Free Energy Calculations (Theory and Applications in Chemistry and Biology)
Editors: Christophe Chipot, Andrew Pohorille
Springer Series in CHEMICAL PHYSICS (Volume 86 2007)

The aim of the course is to provide basic knowledge about theoretical chemistry addressing specific issues of statistical mechanics and thermodynamics concerning equilibrium and nonequilibrium processes. Specifically, the aim is to explore several aspects related to the detailed relation between the quantum nature of a system and its thermodynamical properties, starting from fundamental statistical concepts associated with the fashion of populating quantum states. Furthermore, modern theories will be discussed, which provide a precise statistical statement of the second principle of thermodynamics. Optionally, it will be possible to perform a computer training to compute thermodynamical properties of a system exploiting molecular data obtained by means of quantum chemistry calculations.

The knowledge acquired in the part of statistical mechanics of the course of "Advanced Chemical-Physics" (B012815) is very useful for a fruitful participation to the course.

Lessons of theory (5 CFU) will be accompanied to computer practice (1 CFU).

The exam is oral and consists of a deep discussion of a topic presented in the lectures and communicated to the student about 24 hours before the discussion. The computer training, if done, will be evaluated and contribute to the final result.

Quantum states and complexions. Concepts of distribution and distribution number. Permutations. Number of complexions for a system of independent and distinguishable molecules (degenerate and non-degenerate cases). Probability of a distribution. Microcanonical ensemble. Maxwell-Boltzmann distribution law. Molecular partition function. Average values of molecular properties. Statistical interpretation of temperature. Entropy. Entropy Boltzmann law. Second principle of thermodynamics. Calculation of thermodynamical properties. Canonical ensemble. Ensemble averages. Ergodic hypothesis. Partition function of a macroscopic system. Canonical ensemble of independent particles. Factorization of the molecular partition function. Maxwell-Boltzmann distribution law for indistinguishable particles (gaseous systems). Translational partition function. State equation of a perfect gas (determination of the Boltzmann constant). Factorization of the internal partition function. Nuclear, electronic, vibrational and rotational partition functions. Specific heats. Einstein model and Debye theory for the specific heat of a crystal. Mixtures. Mixing entropy of ideal liquid and solid solutions and of perfect gases. Statistical calculation of equilibrium constants. Equilibrium constants of simple systems. Phase space. Partition function and phase integral Q in a classic system. Factorization of Q in the phase space. Calculation of Q in simple classic systems. Energy equipartition. Molecular velocities. Bose-Einstein and Fermi-Dirac statistical distribution laws. Electrons in metals. Gas of bosons and Bose-Einstein condensation. Nonequilibrium statistical thermodynamics. Calculation of equilibrium properties from nonequilibrium quantities. Transient fluctuation theorem by Crooks. Jarzynski equality. Statistical statement of the second principle of thermodynamics and of related theorems. Computer training.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **CARDONA FRANCESCA** **Matricola: 098992**

Docente **CARDONA FRANCESCA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**
Insegnamento: **B012877 - CHIMICA VERDE**
Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**
Anno regolamento: **2019**
CFU: **6**
Settore: **CHIM/06**
Tipo Attività: **C - Affine/Integrativa**
Anno corso: **2**
Periodo: **Secondo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|--|
| Lingua insegnamento | italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Il corso intende fornire agli studenti una panoramica su conoscenze, stato attuale e prospettive future del modo di operare trasformazioni chimiche per l'ambiente, ovvero in maniera eco-compatibile e in considerazione di uno sviluppo sostenibile, secondo i principi della cosiddetta Chimica Verde ("Green Chemistry"). Saranno considerati principalmente processi della chimica organica di sintesi e saranno discusse le alternative possibili con esempi reali tratti dalla letteratura chimica. |
| Testi di riferimento | Libri di testo: 1) M. Lancaster GREEN CHEMISTRY: an introductory text. RSC PAPERBACKS. 2) R. A. Sheldon, I. Arends, U. Hanefeld GREEN CHEMISTRY AND CATALYSIS. Wiley-VCH. 3) J. -E. Bäckvall MODERN OXIDATION METHODS. Wiley-VCH. 4) P. Tundo, V. Esposito GREEN CHEMICAL REACTIONS. Springer |
| Obiettivi formativi | Lo studente acquisisce una panoramica su conoscenze, stato attuale e prospettive future del modo di operare trasformazioni chimiche per l'ambiente, ovvero in maniera eco-compatibile e in considerazione di uno sviluppo sostenibile, secondo i principi della cosiddetta Chimica Verde ("Green Chemistry"). |
| Prerequisiti | Insegnamenti contenenti i prerequisiti (vincolanti e/o consigliati) Corsi raccomandati: CHIMICA ORGANICA I e II |
| Metodi didattici | Proiezione di slides a lezione. Lettura e commento di articoli presi dalla letteratura scientifica. |

| | |
|--|---|
| Altre informazioni | No info aggiuntive |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | Consegna di una relazione sull'attività svolta durante l'esercitazione in laboratorio. Discussione su un articolo preso dalla letteratura. Prova orale finale. |
| Programma esteso | Chimica verde ("Green Chemistry"): definizione, cenni storici, diffusione. Chimica verde e chimica sostenibile. Gli effetti antropogenici. Il disastro di Bhopal. Seveso. La storia del lago Michigan. La bioaccumulazione delle sostanze chimiche nei sistemi biologici. I biocidi organici. I principi della green chemistry. Gli strumenti: materie prime, reagenti, solventi, prodotti, catalizzatori alternativi. Materie prime rinnovabili. Biomassa. Prodotti chimici ottenibili dalla biomassa. Progettazione di processi chimici meno inquinanti. Economia atomica. Reagenti non tossici. I solventi alternativi ai solventi organici tradizionali. Uso di acqua come solvente, di liquidi ionici, fluidi supercritici, solventi fluorurati, reazioni senza solvente. Le microonde come fonte di riscaldamento alternativa. Sintesi organica a flusso. I liquidi ionici. Liquidi ionici ottenibili a partire dai composti naturali. Liquidi ionici chirali. La catalisi nei liquidi ionici. Chimica Verde e Catalisi. Eterogeneizzazione dei catalizzatori. Le reazioni di ossidazione dei composti organici: metodi tradizionali e nuovi metodi di ossidazione. L'uso dell'acqua ossigenata e dell'ossigeno nelle reazioni di ossidazione. Ossidazioni di alcoli e di olefine. Idrossilazione degli alcheni ed epossidazione degli alcheni. |



Testi in inglese

| | |
|--|---|
| | italian |
| | This course aims to furnish the basic knowledge, principles and future perspectives of green chemistry, that is the way to develop chemical transformations which are sustainable for the environment. Green Chemistry includes all aspects of chemistry that reduce impact on human health and on the environment. Examples from synthetic organic chemistry will be mainly taken in consideration, and the possible alternatives will be discussed. Recent examples from the literature will be discussed |
| | Textbooks: 1) M. Lancaster GREEN CHEMISTRY: an introductory text. RSC PAPERBACKS. 2) R. A. Sheldon, I. Arends, U. Hanefeld GREEN CHEMISTRY AND CATALYSIS. Wiley-VCH. 3) J. -E. Bäckvall MODERN OXIDATION METHODS. Wiley-VCH. 4) P. Tundo, V. Esposito GREEN CHEMICAL REACTIONS. Springer |
| | The student will acquire the basic knowledge, principles and future perspectives of green chemistry, that is the way to develop chemical transformations which are sustainable for the environment. |
| | Courses to be used as requirements (required and/or recommended) Courses recommended: CHIMICA ORGANICA I and II |
| | Projecting slides to class. Reading and commenting on articles taken from the scientific literature . |

No additional Info

Report on the activity done in the lab. Discussion of an article taken from the literature.
Final oral test.

Green Chemistry: definition, history, diffusion. Green Chemistry and sustainable chemistry. Anthropogenic effects. Bophal, Seveso, the Michigan lake. Bioaccumulation of chemical substances in biological systems. Organic biocides. The principles of green chemistry. Substances, reagents, solvents, products, catalysts. Renewable sources. Biomass. Chemicals from renewable raw materials. Design of less polluting chemical processes. Atom Economy. Non toxic reagents. Alternative solvents. Water, ionic liquids, supercritical fluids, fluorinated solvents. Microwaves as alternative heating sources. Flow chemistry. Ionic liquids from renewable sources. Chiral ionic liquids. Catalysis in ionic liquids. Green Chemistry and Catalysis. Heterogeneous catalysts. Oxidation reactions. Traditional methods and new oxidation methods. The use of hydrogen peroxide and oxygen in oxidation reactions. Oxidation of alcohols and olefins. Hydroxylation of alkenes. Epoxidation of alkenes.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **FEIS ALESSANDRO** **Matricola: 096260**

Docente **FEIS ALESSANDRO, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B016293 - FOTOCHIMICA**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/02**

Tipo Attività: **B - Caratterizzante**

Anno corso: **1**

Periodo: **Secondo Semestre**



Testi in italiano

Lingua insegnamento

italiana

Contenuti (Dipl.Sup.)

Interazioni luce/molecola. Transizioni elettroniche radiative e non radiative.

Spettroscopie stazionarie e risolte in tempo. Metodi ottici per lo studio di stati eccitati e metodi fototermici.

Fotoisomerizzazione. Fotodissociazione. Reazioni fotochimiche organiche. Trasferimenti di energia intermolecolari fotoindotti. Trasferimenti di elettrone e di protone fotoindotti.

Fotochimica dell'ozono stratosferico. Complessi antenna nei sistemi fotosintetici naturali. Optogenetica.

Testi di riferimento

M. Klessinger, J. Michl. Excited States and Photochemistry of Organic Molecules, VCH.

W.W. Parson,
Modern Optical Spectroscopy, Springer

(disponibile online per gli studenti UNIFI)

P.W. Atkins, R.S. Friedman, Meccanica quantistica molecolare, Zanichelli

Per approfondimenti : V. Balzani, P. Ceroni, A. Juris, Photochemistry and Photophysics: Concepts, Research, Applications, Wiley VCH

Obiettivi formativi

Introduzione ai problemi e processi alla base della fotochimica. Illustrazione dei principali processi fotochimici e fotofisici, con riferimenti ai metodi sperimentali di indagine. Introduzione alla reattività fotochimica elementare di sistemi modello. Discussione sui processi

fotochimici rilevanti in diversi ambiti disciplinari e tecnologici. Riuscire ad interpretare i processi fotochimici e fotofisici sulla base dell'energetica molecolare. Saper valutare la dinamica di stati eccitati e dei meccanismi di accoppiamento fra questi.

Prerequisiti

Corsi vincolanti: nessuno
Corsi raccomandati: nessuno

Metodi didattici

Numero di ore relative alle attività in aula: 40
Numero di ore relative ad attività di laboratorio (lezioni in laboratorio): 12

Modalità di verifica dell'apprendimento

Colloquio su tutti gli argomenti del corso. Almeno 5 appelli annuali.

Programma esteso

Fondamenti di fotochimica

Interazioni luce/molecola. Teoria delle perturbazioni stazionaria e dipendente dal tempo. Regola aurea di Fermi e velocità di transizione.

Stati molecolari elettronici e vibrazionali. Approssimazione adiabatica. Transizioni elettroniche radiative: assorbimento, fluorescenza e fosforescenza. Transizioni elettroniche non radiative: conversione interna, incroci intersistema. Incroci evitati e intersezioni coniche.

Metodi sperimentali per lo studio degli stati eccitati

Spettroscopie stazionarie e risolte in tempo.

Metodi ottici: spettroscopie di assorbimento ed emissione; laser flash photolysis / transient absorption; time-resolved resonance Raman.

Metodi fototermici: transient thermal grating, fotoacustica, thermal lensing/photothermal beam deflection.

Reattività degli stati eccitati

Fotoisomerizzazione. Fotodissociazione. Trasferimento elettronico. Trasferimento di protone. Reazioni fotochimiche organiche.

Fotochimica dell'ozono stratosferico.

Sistemi antenna nei sistemi fotosintetici naturali.

Optogenetica.

Attività di laboratorio : misura della resa quantica di fotoisomerizzazione.



Testi in inglese

Italian

Light/molecule interactions. Radiative and non radiative electronic transitions.

Steady-state and time-resolved spectroscopy. Optical methods for the study of excited states. Photothermal methods.

Photoisomerization. Photodissociation. Organic photochemical reactions. Photoinduced electron and proton transfer.

Photochemistry of stratospheric ozone. Antenna complexes in natural photosynthetic systems. Optogenetics.

M. Klessinger, J. Michl. Excited States and Photochemistry of Organic Molecules, VCH.

W.W. Parson,
Modern Optical Spectroscopy, Springer

(available online for UNIFI students)

P.W. Atkins, R.S. Friedman, Meccanica quantistica molecolare, Zanichelli

Additional information : V. Balzani, P. Ceroni, A. Juris, Photochemistry and Photophysics: Concepts, Research, Applications, Wiley VCH

General introduction to photochemistry. Relevant photochemical and photophysical processes. Experimental methods in photochemistry. Elementary photochemical processes in molecular systems. Photochemistry in nature and technological applications. Knowledge in interpretation of photochemical and photophysical processes on the basis of molecular energetic and to evaluate dynamics of molecules in excited states.

Courses required: none

Courses recommended: none

Contact hours for: Lectures (hours): 40

Contact hours for: Laboratory (hours): 12

Oral exam about all the contents of the lessons. At least 5 dates.

The basics of photochemistry

Light/molecule interactions. Stationary and time-dependent perturbation theory.

Fermi golden rule and transition rates. Electronic and vibrational molecular states. Adiabatic approximation. Radiative electronic transitions: absorption, fluorescence, and phosphorescence. Nonradiative electronic transitions: internal conversion, intersystem crossings. Avoided crossings and conical intersections.

Experimental methods to study excited states

Steady-state and time-resolved spectroscopies. Optical methods: light absorption and emission spectroscopies, laser flash photolysis / transient absorption, time-resolved resonance Raman. Photothermal methods: transient thermal grating, photoacoustics, thermal lensing/photothermal beam deflection.

Excited state reactivity

Photoisomerization. Photodissociation. Electron transfer. Proton transfer. Organic photochemical reactions.

Photochemistry of stratospheric ozone.

Antenna complexes in natural photosynthetic systems.

Optogenetics.

Laboratory: photoisomerization quantum yield measurements.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **ROSATO ANTONIO** **Matricola: 097825**

Docente **ROSATO ANTONIO, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B029103 - LABORATORIO DI BIOINFORMATICA**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2019**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/03**

Tipo Attività: **C - Affine/Integrativa**

Anno corso: **2**

Periodo: **Primo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|--|
| Lingua insegnamento | Italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Lo scopo del corso è consentire agli studenti di familiarizzare con un numero significativo di strumenti di bioinformatica e database; capire i metodi computazionali sottostanti; essere in grado di sfruttare a fondo le capacità degli strumenti; implementare, eseguire e interpretare i risultati di un insieme di analisi bioinformatiche. |
| Testi di riferimento | FONDAMENTI DI BIOINFORMATICA M. Helmer Citterich; F. Ferrè, G. Pavesi, C. Romualdi, G. Pesole Ed. Zanichelli Introduzione alla bioinformatica. G. Valle, M. Helmer Citterich, M. Attimonelli, G. Pesole. Ed. Zanichelli Understanding bioinformatics. Marketa Zvelebil, Jeremy O. Baum Ed. CRC Press |
| Obiettivi formativi | Gli obiettivi formativi includono: 1) Conoscenze di base in ambito bioinformatico 2) Consultazione di banche dati biologiche. 3) Allineamento di sequenze di proteine. 4) Relazione struttura-funzione di proteine. 5) Interazioni fra molecole biologiche |
| Prerequisiti | Biochimica |
| Metodi didattici | Lezioni frontali; esercitazioni individuali in aula; dimostrazioni |

Modalità di verifica dell'apprendimento

L'esame prevede il superamento di una singola prova orale. La prova orale verte su domande relative ai temi trattati a lezione e l'uso degli strumenti visti in laboratorio.

Per sostenere la prova è richiesta l'iscrizione all'esame sul sito web della didattica abilitato alla verbalizzazione elettronica. La lista viene chiusa due giorni prima della data di appello. In funzione del numero di persone che si sono registrate all'appello potrà essere predisposto un calendario di date possibili, comunicato all'inizio dell'esame.

Programma esteso

Il corso consisterà in lezioni ed esercitazioni relative ai seguenti argomenti: server e web server; database; accesso ai dati tramite queries; sequenza genica e proteica; allineamenti di sequenze; profili di sequenze; metodi di clustering; allineamenti strutturali; relazione struttura-funzione in proteine; interazioni proteiche; network biologici: calcolo, visualizzazione e analisi; metodi di modeling strutturale.



Testi in inglese

| | |
|--|--|
| | Italian |
| | At the end of the course the students will: be familiar with a significant number of bioinformatics and database tools; understand the underlying computational methods; be able to take full advantage of the capabilities of the tools; implement, execute and interpret the results of a pipeline of bioinformatic analyses. |
| | FONDAMENTI DI BIOINFORMATICA M. Helmer Citterich; F. Ferrè, G. Pavesi, C. Romualdi, G. Pesole Ed. Zanichelli Introduzione alla bioinformatica. G. Valle, M. Helmer Citterich, M. Attimonelli, G. Pesole. Ed. Zanichelli Understanding bioinformatics. Marketa Zvelebil, Jeremy O. Baum Ed. CRC Press |
| | The educational objectives include: 1) Basic knowledge of bioinformatics tools 2) Use of biological databases. 3) Alignment of protein sequences. 4) Structure-function relationship in proteins. 5) Interactions between biological molecules |
| | Biochemistry |
| | Frontal lessons; hands-on practicals; demonstrations |
| | The oral exam consists of a single interview. It focuses on questions related to the topics covered in the classroom and the tools applied in the lab. To take the exam, students are required to register for the exam on the web site of the teaching enabled for electronic verbalization. The list is closed two days before the date of the exam. Depending on the number of people who registered for the exam, it is possible that the exams will be scheduled over multiple dates, communicated at the beginning of the exam. |
| | The course will consist of lectures and lab practicals on the following topics: servers and web servers; databases; access to data via queries; gene and protein sequence; alignments of sequences; profiles of sequences; clustering methods; structural alignments; structure-function |

relationship in proteins; protein interactions; biological networks:
calculation, visualization and analysis; methods for structural modeling.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **CORDERO FRANCA MARIA** **Matricola: 096088**

Docente **CORDERO FRANCA MARIA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B016299 - LABORATORIO DI PROGETTAZIONE E SINTESI ORGANICA**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/06**

Tipo Attività: **B - Caratterizzante**

Anno corso: **1**

Periodo: **Secondo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|--|
| Lingua insegnamento | italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Analisi retrosintetica: a) disconnessione di composti aciclici e ciclici; b) criteri di valutazione di una sintesi; c) aspetti tattici nelle sintesi. Ricerche su banche dati on-line. Sono previste delle attività da svolgere singolarmente o in gruppo a casa (ricerca bibliografica, lettura mirata di articoli, analisi retrosintetica e sintesi di molecole), in aula (esercizi di retrosintesi, presentazione orale dei compiti assegnati) e in laboratorio (realizzazione di un progetto sintetico). |
| Testi di riferimento | Dispense del docente Corey, E. J.; Cheng, X.-M. "The Logic of chemical Synthesis" Warren, S., Wyatt, P.; G. "Organic synthesis: the disconnection approach" Clayden, J.; Greeves, N.; Warren, S., Organic Chemistry |
| Obiettivi formativi | Il corso si propone di fornire agli studenti gli strumenti per progettare, presentare e realizzare una sintesi organica multistadio e di saper svolgere ricerche mirate di letteratura chimica. |
| Prerequisiti | Corsi vincolanti: - Corsi fortemente raccomandati: CHIMICA ORGANICA I e II |
| Metodi didattici | Numero di ore relative alle attività in aula: 16 Numero di ore relative ad attività di esercitazioni in aula: 24 Numero di ore relative ad attività di laboratorio (in laboratorio): 36 |
| Altre informazioni | Le diapositive proiettate a lezione sono disponibili sulla piattaforma Moodle. Per scopi organizzativi gli studenti interessati a svolgere l'esperienza pratica devono comunicarlo alla docente entro le prime due settimane dall'inizio del corso. |

Modalità di verifica dell'apprendimento

Esame orale riguardo gli aspetti generali dell'analisi retrosintetica, inoltre dovrà essere analizzata una molecola analoga a quelle trattate a lezione per poi proporre una possibile disconnessione ed approccio sintetico. La valutazione complessiva terrà conto della partecipazione alle attività proposte durante il corso (vedi programma esteso) e della relazione scritta sulla sintesi svolta in laboratorio.

Programma esteso

Strategie generali di analisi retrosintetica: a) principi di disconnessione di composti non funzionalizzati e di porzioni di molecola con uno o due gruppi funzionali, carbocicli ed eterocicli; b) criteri generali per la valutazione di una sintesi tra cui sintesi convergente vs lineare, selettività, atom e step economy; c) aspetti tattici nella sintesi di molecole organiche. Utilizzo delle banche dati Reaxys e Scifinder Scholar per la ricerca bibliografica. Il corso prevede inoltre delle attività da svolgere singolarmente o in gruppo a casa (ricerca bibliografica, lettura mirata di articoli di letteratura, analisi retrosintetica e sintesi correlata di una molecola), in aula (risoluzione di esercizi di analisi retrosintetica, presentazione orale dei compiti assegnati) e in laboratorio (realizzazione di un progetto sintetico).



Testi in inglese

italian

Retrosynthetic analysis: a) disconnection of acyclic and cyclic compounds; b) evaluation criteria of a synthesis; c) tactical aspects in synthesis. Research on online databases. The course includes activities to be done individually or in groups at home (bibliographic research, targeted reading of articles, retrosynthesis and synthesis of molecules), in class (retrosynthesis exercises, oral presentation of the assigned tasks), and in the laboratory (realization of a synthetic project).

Professor's handouts.

Corey, E. J.; Cheng, X.-M. "The Logic of chemical Synthesis"
Warren, S., Wyatt, P.; G. "Organic synthesis: the disconnection approach"
Clayden, J.; Greeves, N.; Warren, S., Organic Chemistry

The course aims to provide students with the tools to design, present and implement a multistage organic synthesis and to be able to carry out targeted research of chemical literature.

Required courses: -

Strongly recommended courses: ORGANIC CHEMISTRY I and II

Lectures: 16 hours

Training exercises (in class): 24 hours

Laboratory practice (in laboratory): 36 hours

The slides projected in class are available on the Moodle platform. For organizational purposes, students interested in the practical experience must inform the teacher within the first two weeks of the start of the course.

Oral examination concerning on general aspects of retrosynthetic analysis; in addition, the student will have to analyze a molecule similar to those discussed in class and propose a possible disconnection and synthetic approach. The overall evaluation will take into account the participation in the activities proposed during the course (see extended program) and the written report on the synthesis carried out in laboratory.

General strategies of retrosynthetic analysis: a) principles of disconnection of non functionalized compounds and moieties with one or two functional groups, carbocycles and heterocycles; b) general criteria for the evaluation of a synthesis including convergent vs linear synthesis,

selectivity, atom and step economy; c) tactical aspects in the synthesis of organic molecules. Use of the Reaxys and Scifinder Scholar databases for bibliographic research. The course also includes activities to be carried out individually or in groups at home (bibliographic research, targeted reading of literature articles, retrosynthetic analysis and related synthesis of a molecule), in class (retrosynthetic analysis exercises, oral presentation of the assigned tasks) and in the laboratory (realization of a synthetic project).

Testi del Syllabus

| | | |
|-------------------|---|--------------------------|
| Resp. Did. | NATIVI CRISTINA | Matricola: 095228 |
| Docenti | FRANCESCONI OSCAR, 2 CFU NATIVI CRISTINA, 4 CFU | |
| Anno offerta: | 2020/2021 | |
| Insegnamento: | B012929 - LABORATORIO DI SINTESI DELLE SOSTANZE ORGANICHE NATURALI | |
| Corso di studio: | B088 - SCIENZE CHIMICHE | |
| Anno regolamento: | 2019 | |
| CFU: | 6 | |
| Settore: | CHIM/06 | |
| Tipo Attività: | C - Affine/Integrativa | |
| Anno corso: | 2 | |
| Periodo: | Secondo Semestre | |



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|---|
| Lingua insegnamento | Italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Analisi delle strutture delle principali classi di composti naturali. Moderne metodologie di sintesi applicate alla sintesi delle sostanze naturali. Approfondimento del panorama delle sintesi di letteratura su una specifica classe di composti. Esercitazione pratiche in laboratorio: estrazione in corrente di vapore di oli volatili (da piante o fiori); esecuzione di una sintesi totale (o parte di essa) di una sostanza naturale. |
| Testi di riferimento | P. M. Dewick - Chimica, biosintesi e bioattività delle sostanze naturali - Piccin Ed. |
| Obiettivi formativi | Conoscenze: Approfondire le metodologie di sintesi in chimica organica con applicazioni alla sintesi delle sostanze naturali. Competenze acquisite Conoscenza dei metodi di sintesi di alcune sostanze organiche naturali. Capacità acquisite al termine del corso: Capacità di effettuare sintesi di sostanze organiche naturali in laboratorio. |
| Prerequisiti | No |
| Metodi didattici | Lezioni ed esercitazioni in laboratorio |

| | |
|--|---|
| Altre informazioni | Orario di ricevimento Ogni giorno della settimana previo appuntamento. |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | La relazione scientifica sull'attività di laboratorio è obbligatoria ed è parte integrante dell'esame. La ricerca bibliografica delle sintesi note di una importante sostanza naturale e la descrizione di una di queste sintesi sono anch'esse parte integrante dell'esame. |
| Programma esteso | Analisi delle strutture delle principali classi di composti naturali. Moderne metodologie di sintesi applicate alla sintesi delle sostanze naturali. Approfondimento del panorama delle sintesi di letteratura su una specifica classe di composti. Esercitazione pratica in laboratorio. |



Testi in inglese

| | |
|--|---|
| | Italian |
| | Analysis of the structures of the most important classes of natural products. Modern methodologies in natural product syntheses. Focus on the literature syntheses of a specific class of compounds. Laboratory training: extraction of volatile oils (from plants or flowers) total synthesis (of part of it) of a natural product. |
| | P. M. Dewick - Chimica, biosintesi e bioattività delle sostanze naturali - Piccin Ed. |
| | Knowledge acquired: Study of the synthetic methods in organic chemistry and application to the synthesis of natural compounds. Competence acquired Knowledge of the synthetic approaches to some natural organic compounds. Skills acquired (at the end of the course): Skill to perform the synthesis of natural compounds in the laboratory. |
| | None |
| | Lessons and laboratory practice |
| | Office hours: Every day by appointment. |
| | The scientific report related to the laboratory activity is compulsory and it is part of the exam. The bibliographic search of the literature methods of synthesis of a natural product and the description of one of these syntheses are also part of the exam. |
| | Analysis of the structures of the most important classes of natural products. Modern methodologies in natural product syntheses. Focus on the literature syntheses of a specific class of compounds. Laboratory training. |

Testi del Syllabus

| | | |
|-------------------|---|--------------------------|
| Resp. Did. | SESSOLI ROBERTA | Matricola: 096593 |
| Docenti | PERFETTI MAURO, 1 CFU SESSOLI ROBERTA, 2 CFU SORACE LORENZO, 3 CFU | |
| Anno offerta: | 2020/2021 | |
| Insegnamento: | B020967 - MAGNETISMO MOLECOLARE | |
| Corso di studio: | B088 - SCIENZE CHIMICHE | |
| Anno regolamento: | 2020 | |
| CFU: | 6 | |
| Settore: | CHIM/03 | |
| Tipo Attività: | B - Caratterizzante | |
| Anno corso: | 1 | |
| Periodo: | Secondo Semestre | |



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|---|
| Lingua insegnamento | Italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Principali classi di materiali magnetici molecolari. Principali interazioni: scambio, dipolare, anisotropia magnetica. Formalismo dell'hamiltoniano di spin. Correlazioni magneto-strutturali. Tecniche di indagine: Introduzione con esercitazioni alla magnetometria ac e dc e risonanza paramagnetica elettronica con esercitazioni. Bistabilità ed isteresi in materiali molecolari e nanoscopici. Il processo di inversione della magnetizzazione. Effetti quantistici nella dinamica della magnetizzazione. |
| Testi di riferimento | Gatteschi, Sessoli, Villain, "Molecular Nanomagnets" Oxford University Press 2006 (disponibile in biblioteca) Olivier Kahn "Molecular Magnetism" Wiley 1993 (disponibile presso i docenti) |
| Obiettivi formativi | Lo studente dovrebbe acquisire la capacità di stabilire correlazioni fra le proprietà magnetiche e la struttura molecolare. Dovrebbe acquisire padronanza di base nell'uso dell'hamiltoniano di spin in sistemi discreti quali le molecole. Avrà modo di familiarizzare con le principali tecniche di caratterizzazione delle proprietà magnetiche. Al termine del corso: Lo studente dovrebbe essere in grado di identificare anche in contesti diversi i sistemi e/o le situazioni dove l'analisi delle proprietà magnetiche possa fornire informazioni aggiuntive sul sistema investigato identificando anche la tecnica di indagine più adatta fra quelle studiate. |
| Prerequisiti | Corsi raccomandati: Chimica Inorganica Superiore |

| | |
|--|---|
| Metodi didattici | Numero di ore relative alle attività in aula: 40 Numero di ore relative alle attività in laboratorio: 12 54 |
| Altre informazioni | Copie del materiale didattico disponibile in formato elettronico sulla piattaforma e-learning. Ricevimento: tutti i giorni su appuntamento |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | Viene proposto agli studenti di svolgere una breve esperienza nel laboratorio di magnetismo molecolare seguita dal trattamento dei dati raccolti e alla compilazione di una breve relazione da discutere in sede di esame. In alternativa l'esame si può svolgere mediante un colloquio sugli argomenti del programma. |
| Programma esteso | a) Principali classi di materiali molecolari e nanoscopici di interesse nel magnetismo e principali approcci sintetici. b) Struttura elettronica e proprietà magnetiche: Livelli elettronici del singolo ione; richiami di teoria dei gruppi; Teoria del campo leganti c) Il formalismo dell' Hamiltoniano di spin; Anisotropia magnetica; Interazione di scambio e dipolare. d) Tecniche di indagine nel magnetismo molecolare: Magnetometria in corrente continua; Suscettometria in corrente alternata; Risonanza magnetica elettronica (EPR). e) Tipi di bistabilità elettronica e magnetica e loro applicazioni. Isteresi magnetica in sistemi molecolari e nanoscopici. Analogie e differenze fra materiali molecolari e nanoparticelle magnetiche. |



Testi in inglese

| | |
|--|--|
| | Italian |
| | Principal classes of molecular magnetic materials. Magnetic interactions exchange and dipolar interaction, magnetic anisotropy. Spin Hamiltonian formalism. Magneto-structural correlations Main experimental techniques in magnetism: ac and dc magnetometry, electron paramagnetic resonance. Bistability and hysteresis in molecular and nanoscopic magnetic materials. The process of inversion of the magnetization. Quantum effects in the magnetization dynamics. |
| | Gatteschi, Sessoli, Villain, "Molecular Nanomagnets" Oxford University Press 2006 (available in the library) Olivier Kahn "Molecular Magnetism" Wiley 1993 (available on request) |
| | Students should acquire the ability to establish basic correlation between molecular structure and magnetic properties. The student should also acquire a basic expertise in the use of the Spin Hamiltonian as well as in the use of the most employed experimental techniques. At the end of the course the student should be able to identify the cases where the investigation of magnetic properties can offer additional information on the chemical and electronic structure. The student should also be able to choose the best suited investigation technique among those studied in the course. |
| | Courses recommended: Chimica Inorganica Superiore |
| | Contact hours for: Lectures (hours): 40 Contact hours for: Laboratory (hours): 12 54 |
| | Material used during lectures available in electronic format. Students are received every day upon appointment. |

It is possible to take the exam by performing a short practice in the laboratory of magnetism followed by an analysis of the data collected and the discussion of a short report prepared by the student. Alternatively a standard exam based on questions on the subjects of the program can be chosen.

- a) Principal classes of molecular and nanoscopic materials of interest in magnetism and most employed synthetic approaches.
- b) Electronic structure and magnetic properties. Brief overview of: single ion levels; groups theory; ligand field theory.
- c) Spin Hamiltonian formalism, magnetic anisotropy, Exchange and dipolar interactions.
- d) Experimental techniques in molecular magnetism: DC magnetometry and ac susceptometry; Electron Paramagnetic Resonance (EPR).
- e) Principal classes of electronic and magnetic bistability and their applications. Magnetic hysteresis in molecular and nanoscopic materials. Analogies and differences between molecular materials and magnetic nanoparticles.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **BENCINI ANDREA** **Matricola: 095725**

Docente **BENCINI ANDREA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B012857 - MATERIALI INORGANICI E MOLECOLARI**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2019**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/03**

Tipo Attività: **B - Caratterizzante**

Anno corso: **2**

Periodo: **Primo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|--|
| Lingua insegnamento | Italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Proprietà ottiche e di luminescenza di composti di coordinazione. Materiali funzionali basati su composti di coordinazione e loro uso (catalisi, sfruttamento dell'energia solare, memorizzazione di informazioni, diagnostica medica). Chemosensori ottici. Amplificazione del segnale luminoso ed effetto antenna. Materiali funzionalizzati per la determinazione di analiti in campo ambientale e biomedico. Proprietà magnetiche di materiali. Magneti molecolari. Materiali ibridi organico-inorganici. |
| Testi di riferimento | Durante le lezioni viene fornito materiale didattico quali articoli e monografie di recente pubblicazione. Tale materiale e' anche disponibile presso il docente e on-line |
| Obiettivi formativi | Questo corso ha l'obbiettivo di fornire conoscenze attuali sulla proprietà ottiche e magnetiche dei composti di coordinazione e dei materiali da essi derivati, nonché di dare una visione panoramica dei loro principali utilizzi in campo tecnologico. Lo studente acquisirà le necessarie competenze per lo studio delle proprietà ottiche e magnetiche di complessi metallici a basso peso molecolare e per il loro uso nella realizzazione di nuovi materiali. Lo studente acquisirà le competenze necessarie per l'interpretazione di dati sperimentali relativi alle proprietà ottiche e magnetiche di complessi metallici sintetici a basso peso molecolare e di materiali da essi derivati. |
| Prerequisiti | Corsi vincolanti: nessuno Corsi raccomandati: nessuno |

| | |
|--|---|
| Metodi didattici | Numero di ore relative alle attività in aula: 48 |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | Esame orale (minimo otto appelli annuali). |
| Programma esteso | Chimica, fotochimica e proprietà ottiche dei composti di coordinazione (stati elettronici nei composti di coordinazione, processi fotofisici intramolecolari, reazioni fotochimiche, processi di trasferimento di energia e di elettroni). Materiali funzionali basati su composti di coordinazione utilizzati nel campo dei catalizzatori, chemosensori ottici, sistemi per lo sfruttamento dell'energia solare, materiali per la memorizzazione di informazioni e per la diagnostica medica. Amplificazione del segnale luminoso. Antenne per raccogliere l'energia luminosa in sistemi naturali e artificiali basati su porfirine, ciclodestrine, dendrimeri, polimeri: meccanismo e funzionalità. Effetto degli ioni metallici. Materiali funzionalizzati (nanoparticelle metalliche e di silice, quantum dots) per la segnalazione ottica di analiti e loro uso in campo ambientale e biomedico. Proprietà magnetiche di materiali. Magnetizzazione e suscettività magnetica. Esempi di magneti molecolari. Materiali ibridi organico-inorganici (metal-organic frameworks, MOFs): preparazione, studio e funzionalizzazione. Esempi di utilizzo di MOF per adsorbimento di gas e nella catalisi di reazioni chimiche. |



Testi in inglese

| | |
|--|--|
| | Italian |
| | Optical and luminescence properties of coordination compounds. Materials composed by metal complexes and their uses (catalysis, information storage, utilization of solar power, medical diagnostics). Optical chemosensors. Amplification of the optical signal and antenna effect. Functional materials for analytical and biomedical applications. Magnetic properties of materials. Molecular magnets. Metal-organic frameworks. |
| | Didactic material (articles, monographs) will be provided to students along with the course. The material is also available directly from the teacher and on-line |
| | The aim of the course is to provide to students modern knowledge on the optical and magnetic properties of coordination compounds and on materials formed by coordination compounds. An overview of their technological applications will be also provided. The student will acquire the necessary competence for the study of the optical and magnetic properties of molecular-weight metal complexes and for their use to develop metal-based material for technological applications. The student will acquire the necessary skills for the interpretation of experimental data relative to the optical and magnetic properties of low molecular-weight metal complexes and of materials formed by metal complexes. |
| | Courses required: none Courses recommended: none |
| | Total number of hours for Lectures (hours): 48 |
| | Oral exam (at least eight annual exam sessions). |

Chemistry, photochemistry and optical properties of coordination compounds (electronic states, intramolecular photophysical processes, photochemical reaction, electron-transfer and energy transfer processes). Functionalized materials based on coordination compounds and their use in catalysis, optical chemosensing, solar cells, information storage, medical diagnostic. Amplification of the signal. "Antenna" systems based on porphyrins, cyclodextrins, dendrimers, polymers. Effects of metal ions. Functionalized materials (metal nanoparticles, silica nanoparticles, quantum dots) to optically detect analytes and their environmental and biomedical application. Magnetic properties of materials. Magnetization and magnetic susceptibility. Examples of molecular magnets. Organic-inorganic hybrid materials (metal-organic frameworks, MOFs); preparation and properties. MoFs for gas storage and catalysis.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **LUCHINAT CLAUDIO** **Matricola: 061304**

Docenti **LUCHINAT CLAUDIO, 4 CFU**
TURANO PAOLA, 2 CFU

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B020968 - METABOLOMICA E PROTEOMICA STRUTTURALE NEL DRUG DISCOVERY**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/03**

Tipo Attività: **B - Caratterizzante**

Anno corso: **1**

Periodo: **Secondo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|--|--|
| Lingua insegnamento | Italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Pipeline del drug discovery. Target proteici e non. Costanti di binding e cinetiche. ADMET. Drug design razionale e irrazionale. Fragment-based drug-discovery. Docking in silico. Screening in vitro: fluorimetria, microcalorimetria, surface plasmon resonance. Screening con NMR e X-ray. Metabolomica: definizione, selezione del target e valutazione della risposta individuale. Spettrometria di massa e NMR. Analisi multivariate e univariate. Fenotipo individuale. Applicazioni in campo clinico. |
| Metodi didattici | Lezioni frontali ed esercitazioni pratiche. |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | Esame orale. |
| Programma esteso | La pipeline del drug discovery in era post-genomica. Le fasi cliniche e la farmacogenomica. Brevettazione. Concetto di patologia target, target molecolari; target e pathway. I target classici; interazione fra due proteine come bersaglio. Target proteici e non proteici. Metodi di selezione del target. Definizione di farmaco. Agonisti e antagonisti. Curva dose-risposta. Definizione di costanti di binding e di dissociazione. Relazione con le costanti cinetiche. Inibitori suicidi. Cinetiche enzimatiche, schemi cinetici più complessi. Predizioni ADMET. Le 5 "regole del 5" di Lipinski. Drug design razionale e irrazionale. QSAR. Structure-based drug-design. Fragment-based drug-discovery. Considerazioni termodinamiche e guadagno entropico. Anchoring, merging, tethering. Drug-discovery in silico; struttura del target e programmi di docking. SAR by X-ray: soaking e cocristallizzazione. High-throughput screening (HTS) in vitro: |

fluorimetria, microcalorimetria, surface plasmon resonance. SAR by NMR. Screening con NMR: metodi protein-observed e ligand-observed. La metabolomica: definizione, ruolo nella selezione del target e nella valutazione della risposta individuale al trattamento (precision medicine). Metodologie analitiche in metabolomica: spettrometria di massa e NMR; vantaggi e svantaggi di ciascun approccio. L'importanza della fase preanalitica. Metodi statistici per il trattamento dei dati: analisi multivariate e univariate. Il fenotipo metabolico individuale. Esempi di applicazioni della metabolomica in campo clinico.



Testi in inglese

Italian

Testi del Syllabus

| | | |
|-------------------|---|--------------------------|
| Resp. Did. | CACCIARINI MARTINA | Matricola: 098968 |
| Docenti | BELLO CLAUDIA, 2 CFU CACCIARINI MARTINA, 4 CFU | |
| Anno offerta: | 2020/2021 | |
| Insegnamento: | B029105 - METODI DI INDAGINE STRUTTURALE IN CHIMICA ORGANICA | |
| Corso di studio: | B088 - SCIENZE CHIMICHE | |
| Anno regolamento: | 2020 | |
| CFU: | 6 | |
| Settore: | CHIM/06 | |
| Tipo Attività: | B - Caratterizzante | |
| Anno corso: | 1 | |
| Periodo: | Secondo Semestre | |



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|---|
| Lingua insegnamento | Italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Conoscenze di base per la determinazione strutturale di molecole organiche di sintesi, carboidrati, piccoli peptidi e sostanze naturali mediante tecniche di spettroscopia NMR 1D e 2D. Concetti generali utili per l'acquisizione, la elaborazione e la risoluzione degli spettri NMR di protone, di carbonio e bidimensionali. Cenni di spettrometria di MS avanzata e spettroscopia IR a |
| Testi di riferimento | Un elenco dei testi di riferimento verrà fornito all'inizio del corso. Saranno fornite le slides e ulteriore materiale dal docente. |
| Obiettivi formativi | Conoscenze: In questo corso gli studenti utilizzeranno le conoscenze acquisite nei corsi base di Chimica Organica. Capacità acquisite al termine del corso: Risultano obiettivi specifici: Imparare ad acquisire, elaborare ed interpretare spettri NMR 1D e 2D e a determinare la struttura di molecole organiche di media complessità attraverso tecniche di spettroscopia NMR, MS e IR |
| Prerequisiti | Conoscenze di base di Chimica Organica. |
| Metodi didattici | Numero di ore relative alle attività in aula (lezioni frontali e esercitazioni) e allo strumento: 60 |

| | |
|--|--|
| Modalità di verifica dell'apprendimento | Esame finale costituito da (i) il riconoscimento o l'analisi della caratterizzazione di un composto organico e (ii) una presentazione orale su un argomento scelto tra quelli messi a disposizione dai docenti. |
| Programma esteso | Introduzione. Strumentazione e preparazione dei campioni. Spettroscopia ¹ H. La risonanza. Lo spostamento chimico. Costante di schermo. Fattori che influenzano il chemical shift: effetti induttivi, mesomerici e correnti d'anello. Accoppiamento spin-spin, multipletti e sistemi di spin. Equivalenza chimica e magnetica. Principali parametri di acquisizione per spettri monodimensionali. Gli osservabili NMR. Acquisizione e interpretazione di spettri di protone. Spettroscopia ¹³ C-NMR. Disaccoppiamento dal protone. DEPT. APT. Acquisizione e interpretazione di spettri di carbonio. Elaborazione della FID e make-up di spettri monodimensionali. Introduzione alla spettroscopia NMR bidimensionale. Esperimenti omonucleari e eteronucleari. COSY. TOCSY. NOESY. Hetcor e HSQC. COLOC e HMBC. I principali parametri di acquisizione per spettri bidimensionali. Interpretazione di spettri 1D e 2D-NMR integrati da spettri IR e di MS per il riconoscimento e l'analisi di molecole organiche. Ricapitolazione dei vari metodi di ionizzazione usati nella spettrometria di massa e applicazioni. Spettrometria di massa ad alta risoluzione. Cenni di spettrometria di massa avanzata (massa tandem) |



Testi in inglese

| | |
|--|--|
| | Italian |
| | Basic knowledge for the structural determination of synthetic organic molecules, carbohydrates, small peptides and natural products by means of 1D and 2D NMR spectroscopy. General concepts useful for the acquisition, the elaboration and the assignments of proton, carbon and bidimensional NMR spectra. Advanced MS spectrometry and IR spectroscopy complementary information will be furnished. |
| | The list of the textbooks will be presented in the introductory lecture of the course. The powerpoint presentation of the lectures will be provided. |
| | Knowledge requested: Knowledge about the fundamental of organic chemistry are requested. Skills acquired: Acquisition, elaboration and interpretation of 1D and 2D-NMR spectra to determine the structure of organic molecules via NMR, MS and IR techniques. |
| | Basic knowledge of Organic Chemistry |
| | Total hours of the course activities (including lectures, assignments, practical exercises, discussion etc...): 60 |
| | Final examination will deal with (i) the structure determination or the critical analysis of the full characterization of an organic compound and (ii) an oral presentation on a topic chosen among those proposed by the lecturers. |
| | Introduction. Instruments and sample preparation. ¹ H spectroscopy. Resonance. Chemical shift. Factors influencing the chemical shift: inductive effects, mesomeric effects and ring currents. Spin-spin coupling, multiplets and spin systems. Chemical and magnetical equivalence. Main acquisition parameters for mono-dimensional spectra. NMR observables. Acquisition and interpretation of proton NMR spectra. ¹³ C-NMR spectroscopy. Proton decoupling. DEPT. APT. Acquisition and interpretation of carbon NMR spectra. FID elaboration and spectra make-up. Introduction to 2D NMR spectroscopy. Homonuclear and heteronuclear NMR experiments. COSY. TOCSY. NOESY. Hetcor and |

HSQC. COLOC and HMBC. Main acquisition parameters for bidimensional spectra. Interpretation of 1D and 2D-NMR spectra together with IR and MS spectra for the structure determination of unknown compounds. Summary of the ionization methods used in mass spectrometry and their application. High resolution mass spectrometry. Essentials of advanced mass spectrometry (tandem MS)

Testi del Syllabus

Resp. Did. **GIANNI ROBERTO** **Matricola: 095499**

Docente **GIANNI ROBERTO, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B012823 - METODI MATEMATICI E STATISTICI**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **MAT/07**

Tipo Attività: **C - Affine/Integrativa**

Anno corso: **1**

Periodo: **Primo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|--|--|
| Lingua insegnamento | Italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Elementi di analisi complessa, spazi di Hilbert, serie di Fourier, trasformate di Fourier, esempi ed applicazioni |
| Testi di riferimento | Matematica per l'Ingegneria dell'Informazione Giulio Cesare Barozzi Zanichelli |
| Obiettivi formativi | La comprensione e l'utilizzo di alcuni importanti strumenti matematici impiegati nell'ambito della fisica, della chimica e, più in generale, delle applicazioni |
| Prerequisiti | Teoria dell'integrazione, calcolo differenziale, successioni e serie numeriche e di funzioni (o almeno di potenze). O.D.E. Algebra dei numeri complessi, funzioni complesse fondamentali |
| Metodi didattici | Lezioni in classe con esercitazioni |
| Altre informazioni | Nessuna |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | Esame orale con esercizi |

Programma esteso

Funzioni complesse fondamentali, le funzioni olomorfe, derivata complessa e sua rappresentazione, condizione di Cauchy-Riemann. Serie di potenze e funzioni olomorfe. Formula di rappresentazione delle funzioni olomorfe, il teorema dei residui. Spazi di Hilbert, le serie di Fourier e le loro proprietà, convergenza puntuale, in media aritmetica ed in norma L_2 delle serie di Fourier. La trasformata di Fourier e le sue proprietà, formula di inversione, la trasformata di Fourier nello spazio L_2 . Esercizi ed applicazioni



Testi in inglese

| | |
|--|---|
| | Italian |
| | Complex analysis, Hilbert spaces, Fourier series, Fourier transform, examples and applications |
| | Matematica per l'Ingegneria dell'Informazione Giulio Cesare Barozzi Zanichelli |
| | The understanding and ability to use some important mathematical techniques of great usefulness in the fields of physics, chemistry and, more in general, of applied mathematics |
| | Integration theory, calculus, both numerical and functions sequences and series (or at least power series). O.D.E. Algebraic properties of complex number, knowledge of the most important complex functions |
| | Classroom lessons during which exercises will be solved |
| | None |
| | Oral exam with exercises |
| | The most important complex functions, holomorphic functions, complex derivative and its representation, Cauchy-Riemann conditions. Power series and holomorphic functions. Representation formula for holomorphic functions, residue theorem. Hilbert spaces, Fourier series and its properties, pointwise convergence, arithmetic average convergence and L_2 convergence of a Fourier series. Fourier transform and its properties, inverse Fourier transform, Fourier transform in L_2 space. Exercises and applications |

Testi del Syllabus

Resp. Did. **PAGLIAI MARCO** **Matricola: 106097**

Docente **PAGLIAI MARCO, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B016301 - METODI SPERIMENTALI DI INDAGINE STRUTTURALE E DINAMICA**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/02**

Tipo Attività: **B - Caratterizzante**

Anno corso: **1**

Periodo: **Primo Semestre**



Testi in italiano

Lingua insegnamento italiano

Contenuti (Dipl.Sup.) Funzioni di correlazione classiche e quantistiche. Rilassamento. Forme di riga e funzioni di correlazione. Risposta lineare; matrice densità. Interazione con la radiazione. Rappresentazione diagrammatica. Suscettività lineare e non lineare. Spettroscopia non lineare in tempo ed in frequenza. Laser e sorgenti coerenti; tecniche di misura. Effetto Kerr ottico. Spettroscopia eccitazione-sonda. Spettroscopie coerenti elettroniche e vibrazionali, CARS, eco di fotoni, spettroscopie bidimensionali.

Testi di riferimento G. C. Schatz and M. A. Ratner, Quantum Mechanics in Chemistry. (Dover Publications, Mineola, NY, 2002).
E. Bittner, Quantum Dynamics. (CRC Press, Boca Raton, 2010)
Minhaeng Cho, Two-Dimensional Optical Spectroscopy. (CRC Press, Boca Raton, 2009)
S. Mukamel, Principles of Nonlinear Optical Spectroscopy. (Oxford University Press, New York, 1995).

Obiettivi formativi Conoscenza delle basi teoriche della dinamica molecolare quantistica e dell'interazione radiazione materia, basata sulla matrice densità e sulle funzioni di correlazione. Capacità di descrivere su tali basi gli effetti ottici non lineari utilizzati in diverse tecniche di spettroscopia coerente, e di metterli in relazione con le osservabili sperimentali significative. Conoscenza dei principi di funzionamento delle sorgenti di luce coerente.

Prerequisiti Corsi vincolanti: nessuno
Corsi raccomandati: nessuno

| | |
|--|---|
| Metodi didattici | Attività in aula: ore 48 |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | Prova orale. Domande su argomenti del corso. Lo studente deve dimostrare una sufficiente conoscenza degli argomenti del corso. |
| Programma esteso | Dinamica di sistemi molecolari e funzioni di correlazione classiche. Funzioni di correlazione quantistiche. Funzioni di correlazione, rilassamento, defasamento. Forme di riga e funzioni di correlazione. Modello di Kubo. Rappresentazione di Heisemberg e rappresentazione d'interazione: sviluppo dell'operatore evoluzione temporale. Risposta lineare; matrice densità. Sistema a due livelli: caso dello spin $\frac{1}{2}$. Risonanza magnetica: modello di Bloch. Generalizzazione del modello di Bloch alla spettroscopia ottica. Interazione del sistema molecolare con la radiazione, trattamento perturbativo. Espansione perturbativa della matrice densità: funzione risposta e polarizzazione ai vari ordini perturbativi. Rappresentazione diagrammatica. Suscettività lineare e non lineare. Spettroscopia non lineare. Spettroscopia risolta nel tempo: il "film molecolare". Aspetti sperimentali: laser e sorgenti coerenti; tecniche di misura. Dinamica delle molecole in fase liquida: effetto Kerr ottico. Spettroscopia eccitazione-sonda: dinamica degli stati eccitati in sistemi biologici. Spettroscopie coerenti di transizioni elettroniche e vibrazionali; CARS, eco di fotoni, spettroscopie bidimensionali. |



Testi in inglese

| | |
|--|---|
| | italian |
| | Classical and quantum correlation functions. Relaxation. Lineshape and correlation functions. Linear response; density matrix. Diagrammatic representation. Linear and non linear susceptibility. Time and frequency domain spectroscopy. Laser and coherent sources; measurements techniques. Optical Kerr effect. Pump-probe spectroscopy. Coherent electronic and vibrational spectroscopy: CARS, photon echo, two-dimensional spectroscopies. |
| | G. C. Schatz and M. A. Ratner, Quantum Mechanics in Chemistry. (Dover Publications, Mineola, NY, 2002). E. Bittner, Quantum Dynamics. (CRC Press, Boca Raton, 2010) Minhaeng Cho, Two-Dimensional Optical Spectroscopy. (CRC Press, Boca Raton, 2009) S. Mukamel, Principles of Nonlinear Optical Spectroscopy. (Oxford University Press, New York, 1995). |
| | To get acquainted to the theoretical basis of quantum molecular dynamics and of radiation-matter interaction, on the basis of density matrix and correlation functions description. To be able of describing on those bases the non linear optical effects used in different coherent spectroscopic techniques, and to relate them to the relevant experimental observables. To become aware of the basic principles of the coherent light sources. |
| | Courses required: none Courses recommended: none |
| | Lectures: 48 hours |

Oral examination.

Questions on the topics of the course.

The student need to demonstrate a sufficient knowledge of the course topics.

Dynamics of molecular systems and classical correlation functions. Quantum correlation functions. Correlation functions, relaxation, dephasing. Lineshape and correlation functions. Kubo picture. Heisemberg and interactions representations: expansion of the time evolution operator. Linear response; density matrix. Two-level system: the $\frac{1}{2}$ spin case. Magnetic resonance: Bloch picture. Generalization of the Bloch picture to optical spectroscopy. Radiation - molecule interaction: perturbative treatment. Perturbative expansion of the density matrix: response function and polarization at the different perturbation orders. Diagrammatic representation. Linear and non-linear susceptibility- Non linear spectroscopy. Time resolved spectroscopy: the "molecular movie". Experimental topics: laser and coherent light sources; measurement techniques. Molecular dynamics in the liquid phase: optical Kerr effect. Pump-probe spectroscopy: dynamics of excited states in biological systems. Coherent spectroscopies of electronic and vibrational transitions: CARS, photon echo, two-dimensional spectroscopies.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **BANCI LUCIA** **Matricola: 074878**

Docente **BANCI LUCIA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B012827 - METODI SPETTROSCOPICI DI INDAGINE IN CHIMICA INORGANICA**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2019**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/03**

Tipo Attività: **C - Affine/Integrativa**

Anno corso: **2**

Periodo: **Primo Semestre**

Testi in italiano

Lingua insegnamento Italiano

Contenuti (Dipl.Sup.) Lo spettro elettromagnetico e le varie tecniche spettroscopiche. Intervalli di energia delle tecniche spettroscopiche più comuni. Scale di tempo coinvolte e tempi di vita degli stati eccitati. Principi di base e applicazioni potenziali delle spettroscopie più rilevanti (spettroscopie di risonanza magnetica nucleare e elettronica, spettroscopia elettronica, a raggi X e Moessbauer).

Testi di riferimento

Obiettivi formativi Il corso vuole fornire le conoscenze di base sulle tecniche spettroscopiche che permettono la caratterizzazione delle proprietà strutturali, dinamiche e funzionali di vari classi di molecole con particolare attenzione a quelle contenenti ioni metallici.

Prerequisiti Corsi vincolanti: nessuno
Corsi raccomandati: nessuno

Metodi didattici Numero di ore per le le attività in aula: 50

Altre informazioni

Modalità di verifica dell'apprendimento

L'esame prevede il superamento di una prova orale sugli argomenti trattati nel corso.

Per sostenere la prova è richiesta l'iscrizione all'esame sul sito web di UniFi abilitato alla verbalizzazione elettronica. La lista viene chiusa due giorni prima della data di appello. Viene garantito il minimo numero di appelli e la docente è a disposizione ad inserire ulteriori appelli su richiesta degli studenti.

Il calendario di esami per l'a.a. 2018/2019 è disponibile al link:
<https://sol.unifi.it/docprenot/docprenot>

Commissione di esame : L. Banci, M. Lelli, F. Cantini, V. Calderone

Programma esteso

Nel corso verrà analizzato lo spettro elettromagnetico e gli intervalli di energia delle varie tecniche spettroscopiche. Verranno presentati i principi di base delle spettroscopie di risonanza magnetica elettronica e nucleare e della spettroscopia elettronica e verranno dati cenni sulle spettroscopie a raggi X e Moessbauer. Verranno analizzati i campi di applicazione, le potenzialità e i limiti delle varie tecniche e le informazioni specifiche che forniscono. Il corso prevede lezioni in aula e esercitazioni pratiche agli spettrometri e al computer.



Testi in inglese

| | |
|--|---|
| | Italian |
| | Electromagnetic spectrum and various spectroscopic techniques. Energy ranges of the most common techniques. Time scale of the common spectroscopies. The basic concepts and potential applications of some relevant spectroscopies (magnetic resonance spectroscopies, electronic and nuclear, electronic spectroscopy, X-ray and Moessbauer spectroscopies). |
| | |
| | The course aims at providing the students with a basic knowledge of spectroscopic techniques which allow the description of the structural, dynamical and functional properties of various classes of molecules, with particular focus on coordination compounds, containing metal ions. |
| | Courses required: none Courses recommended: none |
| | Hours of Lectures: 50 |
| | |
| | The examination involves an oral test on the topics covered in the course. To take the exam, registration at the UniFi website, which enables electronic record of the exam, it is required. The list closes two days |

before the date of the examination.

It is guaranteed a minimum number of exam rounds and the teacher is available to enter further exam rounds upon student request.

The exam schedule for the academic year 2018/2019 is available at:
<https://sol.unifi.it/docprenot/docprenot>

Examination commission: L. Banci, M. Lelli, F. Cantini, V. Calderone

Within the course, the electromagnetic spectrum and the energy ranges of the most common techniques will be analyzed. The basic theory of some, common, spectroscopic techniques will be presented. In particular magnetic resonance techniques (nuclear and electron), electron spectroscopy, and X-ray and Moessbauer spectroscopies will be presented, with specific focus on potentialities and limitations of each technique and on the information which can be gained from them. Practical tutorials at the spectrometers and at computer will be organized.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **RIDI FRANCESCA** **Matricola: 167254**

Docente **RIDI FRANCESCA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B020970 - METODOLOGIE CHIMICO FISICHE PER LO STUDIO DI NANOSISTEMI**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2019**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/02**

Tipo Attività: **B - Caratterizzante**

Anno corso: **2**

Periodo: **Primo Semestre**



Testi in italiano

Lingua insegnamento Italiano

Contenuti (Dipl.Sup.)

Proprietà dei sistemi alla nanoscala. Gas-porosimetria: area superficiale e del volume dei pori (isoterme di adsorbimento, modelli BET, BJH). Microscopie: ottica, SEM, TEM, STM, AFM. Dynamic Light Scattering, potenziale Z. Introduzione all'analisi termica. Termogravimetria. Proprietà termiche dei nanocompositi polimerici. DSC a modulazione di temperatura. Analisi termica di nanosistemi biologici (microDSC, ITC). Proprietà meccaniche di nanocompositi. Nanoindentazione statistica.

Testi di riferimento

Dispense fornite dal docente.

Obiettivi formativi

Lo scopo del corso è evidenziare le potenzialità di metodi di indagine, sia classici che all'avanguardia, per la valutazione delle proprietà alla nanoscala. Partendo da esempi rappresentativi, saranno introdotte le caratteristiche chimico-fisiche peculiari di nanosistemi e saranno trattate le principali tecniche per la caratterizzazione delle loro proprietà. In particolare, durante le lezioni frontali saranno introdotte le tecniche per lo studio di struttura, area superficiale, morfologia, proprietà termiche e proprietà meccaniche di sistemi nanostrutturati, sia soft che hard matter. Saranno effettuate esperienze pratiche su alcuni degli strumenti trattati nel corso teorico.

Prerequisiti

Corsi vincolanti: nessuno

Corsi raccomandati:
Chimica Fisica II

| | |
|--|---|
| Metodi didattici | Lezioni frontali e esercitazioni pratiche |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | Esame orale basato sull'esposizione e la discussione critica di argomenti trattati durante il corso. |
| Programma esteso | Proprietà dei sistemi alla nanoscala. Nanocompositi. Gas-porosimetria: misura dell'area superficiale e del volume dei pori (isoterme di adsorbimento, modelli BET, BJH). Caratterizzazione morfologica di nanomateriali: microscopie ottica, SEM, TEM, STM, AFM. Caratterizzazione di dimensione, forma e carica di nanostrutture: Dynamic Light Scattering, potenziale Z. Introduzione all'analisi termica. Termogravimetria. Proprietà termiche dei nanocompositi polimerici. DSC a modulazione di temperatura. Analisi termica di nanosistemi biologici (microDSC, ITC). Proprietà meccaniche di nanocompositi. Nanoindentazione statistica. |



Testi in inglese

| | |
|--|--|
| | Italian |
| | Nanoscale properties. Nanocomposites. Gas-porosimetry: surface area and pore volume measurement (adsorption isotherms, BET and BJH models). Microscopies: optical, SEM, TEM, STM, AFM. Dynamic Light Scattering, Z potential. Introduction to thermal analysis. Thermogravimetry. Thermal properties of polymeric nanocomposites. Modulation temperature DSC. Thermal analysis of biological nanosystems (microDSC, ITC). Mechanical properties of nanocomposites. Statistical nanoindentation. |
| | Lecture notes will be provided. |
| | The course is aimed at evidencing the potential of both classical and cutting-edge techniques, in the evaluation of the nanoscale properties. Starting from representative examples, the physico-chemical characteristics of the nanosystems will be introduced and the main techniques for the investigation of these properties will be presented. In particular, the classroom lectures will deal about the methods for the study of the structure, the surface area, the morphology, the thermal and mechanical properties of both soft and hard nanostructured systems. Practical experiences will be performed on some of the presented instruments. |
| | Courses required: none Courses recommended: Physical Chemistry II |
| | Classroom lectures and practical exercises |
| | Oral exam based upon the critical discussion of the topics covered by the course. |

Nanoscale properties. Nanocomposites. Gas-porosimetry: surface area and pore volume measurement (adsorption isotherms, BET and BJH models). Morphological characterization of nanomaterials: optical, SEM, TEM, STM, AFM microscopies.

Characterization of the size, shape and charge of nanostructures: Dynamic Light Scattering, Z potential.

Introduction to thermal analysis. Thermogravimetry. Thermal properties of polymeric nanocomposites. Modulation temperature DSC. Thermal analysis of biological nanosystems (microDSC, ITC). Mechanical properties of nanocomposites. Statistical nanoindentation.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **CARDINI GIANNI** **Matricola: 091190**

Docente **CARDINI GIANNI, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B012829 - MODELLISTICA CHIMICA E DINAMICA MOLECOLARE**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/02**

Tipo Attività: **B - Caratterizzante**

Anno corso: **1**

Periodo: **Secondo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|--|--|
| Lingua insegnamento | italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Introduzione alla modellistica chimica. Note di Meccanica molecolare: forme funzionali semiempiriche, campi di forze. Simulazioni di insiemi molecolari. Dinamica Molecolare classica e insiemi termodinamici. Analisi delle traiettorie. Teoria del funzionale densità e sue applicazioni. Dinamica Molecolare ab-initio: Car-Parrinello. |
| Obiettivi formativi | Acquisire i rudimenti della dinamica molecolare e la capacità di analizzare criticamente i risultati presenti in letteratura. |
| Prerequisiti | Corsi vincolanti: Chimica Fisica I e II Corsi raccomandati: nessuno |
| Metodi didattici | Numero di ore relative alle attività in aula: 48 |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | Esame orale- |
| Programma esteso | Il programma esteso e' riportato sulla pagina moodle del corso. |



Testi in inglese

| | |
|--|---|
| | italian |
| | Introduction to computational chemistry. Molecular mechanics: semiempirical potential functions, force fields. Molecular ensembles simulations. Thermodynamic ensembles and classical molecular dynamics. Analysis of trajectories. Density functional theory and applications. Ab-initio molecular dynamics: Car-Parrinello formulation. |
| | Acquire knowledge and learn the basis of molecular dynamics simulations and the ability to critically analyze molecular dynamics studies. |
| | Courses required: Physical chemistry I and II Courses recommended: none |
| | Total number of hours for Lectures (hours): 48 |
| | Oral exam. |
| | Detailed program will be reported on the moodle web site |

Testi del Syllabus

Resp. Did. **BONINI MASSIMO** **Matricola: 104966**

Docente **BONINI MASSIMO, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B020971 - NANOMATERIALI FUNZIONALI**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/02**

Tipo Attività: **C - Affine/Integrativa**

Anno corso: **1**

Periodo: **Secondo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|---|
| Lingua insegnamento | Italian |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Il corso fornirà le conoscenze generali e specifiche sui materiali funzionali, la loro preparazione, le proprietà chimico-fisiche e le più recenti applicazioni. Attraverso la discussione di alcuni esempi in cui questi materiali hanno trovato applicazione (compositi per ingegneria tissutale, materiali funzionali ottici e magnetici, ibridi responsivi per sensoristica), saranno approfonditi gli aspetti legati a progettazione, sintesi, caratterizzazione e applicazione di questi materiali. |
| Testi di riferimento | Dispense distribuite dal docente mediante la piattaforma Moodle di e-learning di UNIFI |
| Obiettivi formativi | L'obiettivo del corso è l'introduzione degli studenti ai recenti sviluppi nel campo dei nanomateriali funzionali. A partire da casi reali in cui l'impiego di materiali funzionali ha portato a significativi avanzamenti tecnologici, gli studenti acquisiranno conoscenze specifiche a proposito dei principi di progettazione, dei metodi di preparazione, delle proprietà chimico-fisiche e delle tecniche di caratterizzazione che hanno permesso lo sviluppo di questa nuova classe di materiali. |
| Prerequisiti | Insegnamenti propedeutici (vincolanti e/o consigliati) Corsi vincolanti: Nessuno Corsi raccomandati: - Laboratorio di nanomateriali - Chimica fisica dei nanosistemi - Metodologie chimico-fisiche per lo studio di nanosistemi |
| Metodi didattici | Lezioni frontali. |

| | |
|--|--|
| Altre informazioni | No info aggiuntive |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | Esame orale, comprensivo di esercizi, calcoli e esposizione di argomenti affrontati durante il corso. |
| Programma esteso | Questo corso interdisciplinare è orientato a fornire allo studente conoscenze generali e specifiche sui materiali funzionali, la loro preparazione, le loro proprietà chimico-fisiche e le loro più recenti applicazioni nel campo della scienza dei materiali. In particolare, il corso si concentrerà sulle potenzialità dei materiali nanostrutturati ibridi organici-inorganici, in cui la combinazione di più componenti a livello nanometrico e molecolare porta ad una varietà di nuovi materiali e proprietà funzionali. Saranno discusse le più importanti applicazioni di questi materiali, compresi i materiali bio-attivi per ingegneria tissutale, i materiali funzionali ottici e magnetici, polimeri conduttori e transistor ad effetto di campo, materiali per la conversione e l'immagazzinamento di energia, materiali compositi responsivi per applicazioni nel campo della sensoristica. Attraverso questi esempi, saranno discussi in maniera approfondita gli aspetti legati alla progettazione, agli approcci sintetici, alle tecniche di caratterizzazione e all'applicazione di questi materiali. |



Testi in inglese

| | |
|--|--|
| | Italian |
| | The course will provide the students with the general and specific knowledge about functional materials, their preparation, physico-chemical properties and applications. Starting from selected examples where these materials have been applied (composites for tissue engineering, optical and magnetic functional materials, sensing materials), the most relevant aspects related to the design, the synthesis, the characterization and the application of these materials will be analyzed and discussed. |
| | Lecture Notes distributed through the e-learning Moodle Platform by UNIFI |
| | The target of this course is to introduce students to the latest developments in the field of functional nanomaterials. Starting from cases of study in which the use of functional materials has led to significant technological advancements, students will gain knowledge about the design principles, the methods of preparation, the physico-chemical properties and the characterization techniques that have been crucial to the development of this new class of materials. |
| | Courses to be used as requirements (required and/or recommended) Courses required: None Recommended courses: - Physical Chemistry of Nanomaterials - Nanomaterials laboratory - Physico-chemical methods for the study on nanosystems |
| | Class lectures. |

No additional info

Oral examination, including exercises, calculations and exposition of the topics discussed within the course.

This interdisciplinary course is oriented to give general and specific knowledge to the student about functional materials, their preparation, their physico-chemical properties and their most recent applications in the field of material science. In particular, the course will focus on the potentials of composite organic-inorganic materials, where the combination of dissimilar components at the nanometric and molecular level leads to a variety of novel materials and functional properties. The most relevant applications of these materials will be discussed, including bio-active materials for tissue engineering, functional optical and magnetic materials, conducting polymers and field-effect transistors, materials for energy conversion and storage, responsive composites for sensing applications. Across these examples, the design principles, the synthetic approaches, the characterization techniques and the application of these materials will be thoroughly discussed.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **MARRAZZA GIOVANNA** **Matricola: 093077**

Docente **MARRAZZA GIOVANNA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B012935 - SENSORI E BIOSENSORI**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2019**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/01**

Tipo Attività: **C - Affine/Integrativa**

Anno corso: **2**

Periodo: **Primo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|---|
| Lingua insegnamento | Italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Definizione di Sensore e Biosensore. Tecniche di immobilizzazione di enzimi, anticorpi, oligonucleotidi. Le tecniche elettrochimiche, ottiche e piezoelettriche di trasduzione. Applicazioni dei (bio)sensori per la medicina (misura della glicemia e di biomarcatori), per l'ambiente (tossicità, pesticidi) e per il settore alimentare (qualità degli alimenti). |
| Testi di riferimento | Turner, A.P.F., Karube, I. and Wilson, G.S. (1989) Biosensors: Fundamentals and Applications. Oxford University Press, Oxford. Chemical Sensors and Florinel-Gabriel Bănică (2012) Chemical sensors and biosensors: Fundamentals and Applications. John Wiley & Sons, Ltd |
| Obiettivi formativi | Il corso intende fornire allo studente approfondite conoscenze di teoria, funzionamento dei sensori e biosensori. Particolare attenzione sarà data alla loro applicazione pratica in campo clinico, ambientale e alimentare. Il corso darà una descrizione accurata di alcuni sensori e biosensori. Gli studenti conosceranno quelli disponibili commercialmente e quelli oggetto di ricerca. |
| Prerequisiti | Corsi vincolanti: nessuno |
| Metodi didattici | Lezioni ed esercitazioni |
| Altre informazioni | Diapositive del corso sono disponibili sulla piattaforma Moodle. |

| | |
|--|--|
| Modalità di verifica dell'apprendimento | Prova orale o un elaborato su un argomento trattato nel corso. |
| Programma esteso | Definizione di sensore e biosensore. Sensori elettrochimici: potenziometrici, amperometrici e voltammetrici. Sensori FET. Sensori piezoelettrici. Sensori ottici. Le tecniche ottiche di trasduzione: Risonanza Plasmonica di Superficie (SPR), SPR imaging. Biosensori catalitici e di affinità. Biosensori catalitici e di affinità. Tecniche di immobilizzazione di enzimi, anticorpi, oligonucleotidi. Applicazioni dei biosensori nella medicina: misura della glicemia e di biomarcatori. Biosensori al DNA: diagnosi di malattie genetiche. Microarray. Applicazione dei biosensori per il monitoraggio ambientale. Misura del BOD. Sensori di tossicità, genotossicità, neurotossicità, pesticidi, erbicidi. Analisi dei metalli. Applicazione dei biosensori per il settore Alimentare (qualità degli alimenti, analisi di tossine e OGM). |



Testi in inglese

| | |
|--|---|
| | Italian |
| | Sensor and biosensor definition. Immobilization techniques of enzymes, antibodies, oligonucleotides. Electrochemical, optical and piezoelectric techniques of transduction. Biosensors application in medicine (glycaemia and biomarkers detection), for the environment (toxicity, pesticides) and for foods (food quality). |
| | Turner, A.P.F., Karube, I. and Wilson, G.S. (1989) Biosensors: Fundamentals and Applications. Oxford University Press, Oxford. Chemical Sensors and Florinel-Gabriel Bănică (2012) Chemical sensors an biosensors: Fundamentals and Applications. |
| | The course supplies to the student thorough knowledge of the theory and the principles of sensors and biosensors. Selected topics of the sensors and biosensors will held. This course will give students an overview of sensors and biosensors. The student will know the sensors and biosensors commercial available and which are present in important research projects. |
| | Courses required: none |
| | Lectures and laboratory activities |
| | Oral test or presentation on topic covered in the course. |
| | Introduction to sensor and biosensor. Electrochemical transducer: potentiometric, amperometric and voltammetric sensors. Sensor FET. Acoustic sensors. Optical transducer: optical fibres, absorbance, Surface Plasmon Resonance. Affinity and catalytic biosensors. Immobilization techniques of enzymes, antibodies, oligonucleotides. Biosensors in health care: glycaemia, biomarkers detection. DNA biosensors for genetic disease diagnosis. Microarray. Environmental biosensors. BOD measurement. Biosensors for the detection of toxicity, pesticides, herbicides. Heavy metals analysis. Biosensor for food analysis (food quality, GMO and toxins detection). |

Testi del Syllabus

Resp. Did. **GIORGI CLAUDIA** **Matricola: 098261**

Docente **GIORGI CLAUDIA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B012711 - SINTESI E REATTIVITA' DEI COMPLESSI METALLICI**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2019**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/03**

Tipo Attività: **C - Affine/Integrativa**

Anno corso: **2**

Periodo: **Secondo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|--|
| Lingua insegnamento | Le lezioni sono in lingua italiana. |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Sintesi dei complessi di ioni metallici: aspetti termodinamici e cinetici. Sintesi metallo-assistite. Applicazioni biochimiche e biomediche della chimica supramolecolare. Complessi di metalli di transizione come recettori per piccole molecole, quali ad esempio O ₂ e NO. Tossicità degli ioni metallici. Terapia di chelazione. Complessi di ioni metallici come agenti terapeutici e diagnostici. |
| Testi di riferimento | Durante le lezioni viene fornito materiale didattico quali articoli e monografie di recente pubblicazione. Tale materiale e' anche disponibile presso il docente. |
| Obiettivi formativi | Questo corso si propone di fornire conoscenze approfondite e attuali sulla sintesi e sulla reattività dei complessi con ioni metallici con particolare attenzione alle loro applicazioni in campo biomedico e farmacologico. Lo studente acquisirà quindi le necessarie competenze per lo studio del ruolo di sistemi metallici a basso peso molecolare in ambienti biologici e per la loro potenziale applicazione farmacologica. |
| Prerequisiti | Insegnamenti contenenti i prerequisiti (vincolanti e o consigliati) Corsi vincolanti: nessuno Corsi raccomandati: Chimica generale e inorganica Laboratorio di Chimica Generale ed Inorganica |
| Metodi didattici | Numero di ore relative alle attività in aula: 48 |

| | |
|--|---|
| Modalità di verifica dell'apprendimento | Esame orale (minimo sette appelli annuali) |
| Programma esteso | Sintesi dei complessi di ioni metallici: aspetti termodinamici e cinetici. Sintesi metallo-assistite. Processi di self-assembling per la formazione di specie complesse organiche e inorganiche e loro uso nella realizzazione di nuovi materiali polifunzionali. Self-assembling in sistemi naturali. Sistemi catalitici e autoreplicanti. Applicazioni biochimiche e biomediche della chimica supramolecolare. Complessi di metalli di transizione come recettori per piccole molecole, quali ad esempio O ₂ e NO, e loro applicazioni in campo biomedico. Tossicità degli ioni metallici. Terapia di chelazione. Complessi di ioni metallici come agenti terapeutici e diagnostici. |

Testi in inglese

| | |
|--|--|
| | Lessons are in Italian. |
| | Synthesis of metal complexes: Thermodynamic and kinetic aspects. Interaction of metal complexes with small molecules. Toxicity of metal ions. Complexes of metal ions such as therapeutic and diagnostic agents. |
| | Synthesis of metal complexes: Thermodynamic and kinetic aspects. Interaction of metal complexes with small molecules. Toxicity of metal ions. Complexes of metal ions such as therapeutic and diagnostic agents. |
| | This course will provide recent insights on the synthesis and reactivity of metal complexes with synthetic ligands with special attention to their applications in biomedicine and pharmacology. The student will acquire the necessary competence for the study of the role played by low molecular-weight metal complexes in biological environments and for their potential pharmacological application. |
| | Courses to be used as requirements (required and or recommended) Courses required: none Courses recommended: General and Inorganic Chemistry General and Inorganic Chemistry Laboratory |
| | Contact hours for: Lectures (hours): 48 |
| | A oral test (at least seven exam sessions for year). |
| | Synthesis of metal complexes: Thermodynamic and kinetic aspects. Metal-assisted syntheses. Self-assembling in natural systems. Self-assembling processes for the synthesis of polyfunctional materials. Interaction of metal complexes with small molecules. Toxicity of metal ions. Complexes of metal ions such as therapeutic and diagnostic agents. |

Testi del Syllabus

Resp. Did. **SALVINI ANTONELLA** **Matricola: 095059**

Docente **SALVINI ANTONELLA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B012901 - SINTESI INDUSTRIALI DI COMPOSTI ORGANICI**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/04**

Tipo Attività: **B - Caratterizzante**

Anno corso: **1**

Periodo: **Primo Semestre**



Testi in italiano

Lingua insegnamento

italiano

Contenuti (Dipl.Sup.)

Fonti di materie prime e prodotti chimici: la bioraffineria. Sintesi da CO e H₂: Idrocarburi; Metanolo; Metil formiato; Glicol etilenico; Reazioni di idroformilazione e carbonilazione. Ossidazione idrocarburi alifatici e aromatici: Ossidazione di alcani; alcheni; nafteni; Ossidazione idrocarburi aromatici. Nitrobenzene e anilina.

Alcooli per idratazione delle olefine: Idratazione indiretta e diretta. Processo Conoco. Glicerina. Formaldeide.

Testi di riferimento

B. Kamm, P. R. Gruber, M. Kamm, Biorefineries – Industrial Processes and Products, Wiley-VCH, 2006.

K. Weissermel, H.-J.-Arpe, Industrial Organic Chemistry, VCH, Fed. Rep. of Germany, 1997.

L. Berti, M. Calatuzzolo, R. di Bartolo, Processi petroliferi e petrolchimici, G. D'Anna, Firenze, 1980.

L. Berti, M. Calatuzzolo, R. di Bartolo, Aspetti teorici e pratici dei processi chimici, G. D'Anna, Firenze, 1980.

L. Berti, M. Calatuzzolo, R. di Bartolo, Processi di carbonilazione, ossidazione, idrogenazione e idratazione, G. D'Anna, Firenze, 1980.

L. Berti, M. Calatuzzolo, R. di Bartolo, Processi di alchilazione, nitrurazione, solfonazione e alogenazione, G. D'Anna, Firenze, 1980.

A. Girelli, L. Matteoli, F. Parisi, Trattato di Chimica Industriale ed Applicata, II ed, vol 1 e 2, Zanichelli editore, Bologna, 1969.

K. Weissermel, H.-J.-Arpe, Chimica Organica Industriale, Piccin Ed., Padova, 1981

Ullmann's, Encyclopedia of Industrial Chemistry, 5 ed., VCH Pub., 1988

Obiettivi formativi

Conoscere alcuni dei principali processi dell'industria chimica organica e sensibilizzazione ai problemi scientifici, tecnici, economici ed ambientali che determinano la scelta di un processo industriale. Competenze relative alla valutazione di un processo di sintesi in chimica organica dal punto di vista della sua efficienza, economicità, impatto ambientale.

Capacità di giudicare un processo di sintesi di chimica organica dal punto di vista della sua efficienza, economicità, impatto ambientale.

| | |
|--|--|
| Prerequisiti | Corsi vincolanti: Tutti i corsi di chimica organica della laurea di 1° livello Corsi raccomandati: nessuno |
| Metodi didattici | Attività in aula: 48 ore Numero di ore relative ad attività di esercitazioni facoltative con visite in aziende: 3-5 |
| Altre informazioni | Frequenza delle lezioni: fortemente consigliata |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | Esame orale: domande e discussione sulla sostenibilità nei processi di chimica industriale e descrizione di processi industriali |
| Programma esteso | Fonti di materie prime e prodotti chimici. Sintesi da CO e H ₂ : Sintesi idrocarburi; Metanolo; Metil formiato; Glicol etilenico; Aldeidi per idroformilazione; Reazioni di carbonilazione. Ossidazione idrocarburi alifatici: Ossidazione paraffine; Ossidazione etilene; Ossidazione propene; Ossidazione buteni; Ossidazione nafteni; Ossidazione idrocarburi aromatici: Fenolo; Diidrossibenzeni; Anidride ftalica e maleica; Acidi ftalici; Nitrobenzene e anilina; Idratazione delle olefine: Idratazione indiretta; Idratazione diretta. Processo Conoco; Glicerina; Formaldeide. |



Testi in inglese

| | |
|--|--|
| | italian |
| | Energy fonts and Chemical products: Biorefinery. Syntheses from CO and H ₂ : Hydrocarbons; Methanol; Methyl formate; Ethylen glycol; Hydroformylation and carbonylation reactions. Oxydation of aliphatic hydrocarbons: Paraffin oxydation; Alkene oxydation; Naphtene oxidation. Oxydation of aromatic hydrocarbons. Nitrobenzene and aniline. Alcohols through olefin hydratation: Indirect and Direct hydratation; Conoco process; Glycerin. Formaldehyde. |
| | B. Kamm, P. R. Gruber, M. Kamm, Biorefineries - Industrial Processes and Products, Wiley-VCH, 2006. K. Weissmermel, H.-J.-Arpe, Industrial Organic Chemistry, VCH, Fed. Rep. of Germany, 1997. L. Berti, M. Calatuzzolo, R. di Bartolo, Processi petroliferi e petrolchimici, G. D'Anna, Firenze, 1980. L. Berti, M. Calatuzzolo, R. di Bartolo, Aspetti teorici e pratici dei processi chimici, G. D'Anna, Firenze, 1980. L. Berti, M. Calatuzzolo, R. di Bartolo, Processi di carbonilazione, ossidazione, idrogenazione e idratazione, G. D'Anna, Firenze, 1980. L. Berti, M. Calatuzzolo, R. di Bartolo, Processi di alchilazione, nitrurazione, solfonazione e alogenazione, G. D'Anna, Firenze, 1980. A. Girelli, L. Matteoli, F. Parisi, Trattato di Chimica Industriale ed Applicata, II ed, vol 1 e 2, Zanichelli editore, Bologna, 1969. K. Weissmermel, H.-J.-Arpe, Chimica Organica Industriale, Piccin Ed., Padova, 1981 Ullmann's, Encyclopedia of Industrial Chemistry, 5 ed., VCH Pub., 1988 |
| | Knowledge of some of the main industrial organic processes and the criteria followed to solve scientific, technical, economic and environmental problems connected with the illustrated processes. Competence on some industrial processes by a point of view of their |

technical, scientific, economic and environmental problems.
Skills to evaluate a chemical organic process following scientific, economic and environmental criteria.

Courses required:
All courses of organic chemistry of the first level degree

Courses recommended: none

Lectures: 48 hours
Laboratory-field/practice (optional): 3-5 hours

Frequency of lectures: Highly recommended.

Oral examination:
questions and discussion on sustainability in industrial chemistry and description of industrial processes

Energy fonts and Chemical products.
Syntheses from CO and H₂: Syntheses of hydrocarbons; Methanol; Methyl formate; Ethylen glycol; Aldehydes by hydroformylation; Carbonylation reactions.
Oxydation of aliphatic hydrocarbons: Paraffin oxydation; Ethylene oxydation; Propene oxydation; Butenes oxydation; Naphtene oxydation; Oxydation of aromatic hydrocarbons: Phenol; Dihydroxybenzenes; Phtalic anhydride and maleic anhydride; Phtalic acids; Nitrobenzene and aniline; Olefin hydratation: Indirect hydratation, Direct hydratation. Conoco process; Glycerin; Formaldehyde.

Testi del Syllabus

| | | |
|-------------------|---|--------------------------|
| Resp. Did. | CHELLI RICCARDO | Matricola: 104965 |
| Docenti | CHELLI RICCARDO, 3 CFU RAVERA ENRICO, 3 CFU | |
| Anno offerta: | 2020/2021 | |
| Insegnamento: | B020966 - SOLIDI MOLECOLARI: STRUTTURA, DINAMICA E SPETTROSCOPIE OTTICHE E NMR | |
| Corso di studio: | B088 - SCIENZE CHIMICHE | |
| Anno regolamento: | 2019 | |
| CFU: | 6 | |
| Settore: | CHIM/02 | |
| Tipo Attività: | C - Affine/Integrativa | |
| Anno corso: | 2 | |
| Periodo: | Secondo Semestre | |



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|--|
| Lingua insegnamento | Italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Stato cristallino. Diffrazione dei raggi X. Metalli. Elettroni in un potenziale periodico debole. Struttura a bande dei solidi. Semiconduttori. Dinamica reticolare. Energia di coesione. Calore specifico dei solidi. Interazioni spin nucleari e di Zeeman. Impulsi di radiofrequenze. Carbon-detection. Rilassamento in presenza di modulazioni coerenti. Paramagnetismo. Esperimenti multidimensionali. Sequenze di impulsi. Esercitazioni su preparazione di campioni solidi. |
| Testi di riferimento | Titolo: Solid State Physics. Autori: Neil W. Ashcroft e N. David Mermin (qualsiasi edizione) Titolo: Introduction to solid state physics. Autore: Charles Kittel (qualsiasi edizione) Titolo: NMR of Paramagnetic Molecules. Autori: Ivano Bertini, Claudio Luchinat, Giacomo Parigi, Enrico Ravera (seconda edizione) Materiale aggiuntivo sarà fornito dai docenti attraverso la piattaforma di e-learning. |
| Obiettivi formativi | Fornire una conoscenza di base della fisica dello stato solido con particolare riguardo allo stato cristallino. Studio di alcune tecniche sperimentali per l'analisi dello stato cristallino. Illustrare alcuni modelli per la descrizione delle proprietà elettroniche in solidi molecolari con esempi di metalli e semiconduttori. Conoscenza approfondita della spettroscopia NMR nei solidi e delle problematiche ad essa connesse. |

Fornire gli strumenti per la comprensione di sequenze di impulsi, da semplici a complesse, per la spettroscopia nei liquidi e nei solidi. Fornire conoscenze di avanguardia sulle metodologie sperimentali per la caratterizzazione di biomolecole, farmaci e materiali.

Prerequisiti

No

Metodi didattici

Lezioni frontali ed esercitazioni. Gli studenti, a seconda del loro numero, saranno invitati a selezionare e discutere uno o più lavori scientifici che riguardano gli argomenti del corso.

Modalità di verifica dell'apprendimento

L'esame è svolto oralmente e si articola nella discussione di due argomenti ciascuno riguardante uno dei due moduli in cui è suddiviso l'insegnamento.

Programma esteso

Stati della materia. Solidi amorfi. Solidi cristallini. Reticolo di Bravais e vettori primitivi. Esempi di reticoli di Bravais. Numero di coordinazione e primi vicini. Cella primitiva e cella unitaria. Cella primitiva di Wigner-Seitz. Base di una struttura cristallina. Reticolo reciproco. Prima zona di Brillouin. Piani reticolari. Indici di Miller. Classificazione dei reticoli di Bravais. Operazioni di simmetria. Gruppo spaziale e gruppo puntuale di un reticolo di Bravais. Sistemi cristallini. Diffrazione dei raggi X. Formulazione di Bragg e formulazione di von Laue. Intensità della radiazione diffratta. Metalli. Modello degli elettroni liberi. Energia di Fermi e sfera di Fermi. Energia, capacità termica e conduttività di un gas di elettroni liberi. Legge di Ohm. Metalli con modello di potenziale periodico. Teorema di Bloch. Condizioni al contorno di Born-von Karman. Equazione di Schrödinger e funzione d'onda per elettroni di Bloch. Superficie di Fermi. Elettroni in un potenziale periodico debole. Equivalenza con il modello ad elettroni liberi. Energia e funzione d'onda di uno stato elettronico energeticamente isolato. Energia e funzione d'onda di un insieme di stati elettronici energeticamente isolati. Caso di due stati elettronici. Struttura a bande e gap di energia fra bande. Semiconduttori. Legge di azione di massa. Donori e accettori. Semiconduttori di tipo p e di tipo n. Dinamica reticolare. Modi normali di un reticolo monodimensionale. Energia di coesione nei cristalli. Calore specifico dei solidi: Teorie di Einstein e di Debye. Le interazioni degli spin nucleari. Differenze tra spettroscopia di risonanza magnetica nucleare allo stato solido e quella in soluzione. Interazione di Zeeman. La necessità di campi magnetici intensi. Tempo di rilassamento longitudinale. Impulsi di radiofrequenze. Strumentazione NMR. Tempo di rilassamento trasversale. Eccitazione selettiva o a banda larga. Chemical Shielding e la sua anisotropia. Effetto della rotazione meccanica del campione. Trattazione matematica. Requisiti strumentali. Interazioni dipolo-dipolo eteronucleari. Utilizzo delle interazioni dipolo-dipolo per ottenere informazione strutturale e dinamica. Interazioni quadrupolo-campo elettrico. Interazioni dipolo-dipolo omonucleari. Effetto delle interazioni omonucleari sullo spettro di protone. Carbon-detection. Rilassamento in presenza di modulazioni coerenti. Effetto dell'interferenza tra moti coerenti e moti incoerenti. Paramagnetismo. L'interazione iperfina: shift di contatto e di pseudocontatto. Allargamento omogeneo e inhomogeneo in solidi paramagnetici. NMR-crystallography. Esperimenti multidimensionali. Sequenze di impulsi. Disaccoppiamento e riaccoppiamento di interazioni nucleari per la determinazione strutturale. Esercitazioni su preparazione di campioni solidi, acquisizione e processing di spettri sotto magic angle spinning. Applicazioni: sistemi biologici e scienza dei materiali.



Testi in inglese

| | |
|--|---|
| | Italian |
| | <p>Crystal state. X-ray diffraction. Metals. Electrons in a weak periodic potential. Band structure of the solids. Semiconductors. Lattice dynamics. Cohesion energy. Specific heat of solids. Nuclear spin interactions. Zeeman Interaction. Radiofrequency pulses. Carbon-detection. Relaxation in the presence of coherent modulations. Paramagnetism. Multidimensional experiments. Pulse sequences. Practicals on sample handling, acquisition and processing of spectra under magic angle spinning.</p> |
| | <p>Title: Solid State Physics. Authors: Neil W. Ashcroft e N. David Mermin (any edition) Title: Introduction to solid state physics. Author: Charles Kittel (any edition) Title: NMR of Paramagnetic Molecules. Authors: Ivano Bertini, Claudio Luchinat, Giacomo Parigi, Enrico Ravera (2nd edition) Additional material will be provided through the e-learning platform.</p> |
| | <p>To provide basic knowledge of the solid state physics, with particular attention to the crystal state. Study of several experimental techniques for the analysis of the crystal state. Illustration of models for the description of electronic properties in molecular solids with examples of metals and semiconductors. To provide an in-depth knowledge of magnetic resonance spectroscopy and related topics. To provide the tools for understanding simple or complex pulse sequences for solution state and solid state magnetic resonance spectroscopy. To provide state-of-the-art knowledge of experimental methods for the characterization of biomolecules, drugs and materials.</p> |
| | No |
| | <p>Lectures and practicals. The students, depending on their number, will be asked to select and discuss one or more scientific papers pertaining the topics of the course.</p> |
| | <p>Oral exam. The student is called to discuss two arguments taken from each series of lessons in which the course is structured.</p> |
| | <p>States of the matter. Amorphous solids. Crystal solids. Bravais Lattice and primitive vectors. Examples of Bravais lattices. Coordination number and nearest neighbors. Primitive and unit cells. Wigner-Seitz primitive cell. Lattice with a basis. Reciprocal lattice. First Brillouin zone. Lattice planes. Miller indices. Classification of Bravais lattices. Symmetry operations. Space and point groups of a Bravais lattice. Crystal systems. X-ray diffraction. Bragg and von Laue formulations of the X-ray diffraction by a crystal. Intensity of the X-ray radiation. Metals. Free electron model for metals. Fermi energy and Fermi sphere. Energy, heat capacity and conductivity of a free electron gas. Ohm law. Periodic potential model for metals. Bloch theorem. Periodic boundary conditions of Born-von Karman. Schrodinger equation and wavefunction for Bloch electrons. Fermi surface. Electrons in a weak periodic potential. Equivalence with the free electron model. Energy and wavefunction of a isolated electronic state and a group of isolated states. The case of two electronic states. Band</p> |

structure and band energy gap. Semiconductors. Law of mass action. Donors and acceptors. p and n type semiconductors. Lattice dynamics. Normal modes of a monodimensional lattice. Cohesion energy of crystals. Specific heat of solids: Einstein and Debye approaches. Nuclear spin interactions. Differences between solution and solid state NMR. Zeeman interaction. Strong magnetic fields. Longitudinal relaxation. Radiofrequency pulses, NMR instrumentation, transverse relaxation, selective or broadband excitation. Chemical shielding and its anisotropy, effects of mechanical rotation of the samples, mathematical treatment and experimental needs. Heteronuclear dipole-dipole interactions. Use of dipole-dipole interactions for structural and dynamical characterization. Nuclear quadrupole interactions. Homonuclear dipole-dipole interactions. Effect of homonuclear dipole-dipole interactions on proton spectra. Carbon detection. Sensitivity enhancement. Relaxation in the presence of coherent modulations. Effect of interference between coherent and non-coherent motions Paramagnetism. Hyperfine interaction: contact shift and pseudocontact shift. Homogeneous and inhomogeneous broadening in paramagnetic solids. NMR-crystallography. Multidimensional experiments and pulse sequences. Decoupling and recoupling of nuclear interactions for structural determination. Practicals on sample handling, acquisition and processing of spectra under magic angle spinning. Applications to biological systems and materials science.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **OCCHIATO ERNESTO GIOVANNI** **Matricola: 098171**

Docente **OCCHIATO ERNESTO GIOVANNI, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B012713 - STEREOCHIMICA**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/06**

Tipo Attività: **B - Caratterizzante**

Anno corso: **1**

Periodo: **Primo Semestre**



Testi in italiano

Lingua insegnamento

Italiano

Contenuti (Dipl.Sup.)

Elementi di simmetria e chiralità. Elementi ed operazioni di simmetria. Elementi stereogenici. Descrittori per la chiralità. Topicità. Prochiralità e prostereogenicità. Chiralità ed attività ottica. Risoluzione racemica. Risoluzioni cinetiche, risoluzioni cinetiche dinamiche. Dicroismo circolare e metodi RX per la determinazione della configurazione assoluta. Conformazione di sistemi aciclici, ciclici ed eterociclici. Spettroscopia NMR dinamica.

Testi di riferimento

Stereochemistry of Organic Compounds
Ernest L. Eliel, Samuel H. Wilen
ISBN: 978-0-471-01670-0
1267 pages
September 1994
Wiley

Obiettivi formativi

Il corso si propone di ampliare le conoscenze di stereochimica organica acquisite nei corsi del ciclo precedente e viene curata l'acquisizione di un linguaggio stereochimico corretto. Lo studente acquisirà la capacità di riconoscere gli elementi di chiralità presenti in una molecola e di attribuirne la configurazione. Saranno affrontate le metodiche impiegate negli studi stereochimici e lo studente sarà in grado di scegliere i metodi più adatti per la determinazione della composizione enantiomerica di un composto chirale (polarimetria, cromatografia, NMR), la separazione degli enantiomeri (cristallizzazione, formazione di diastereoisomeri, metodi cromatografici, risoluzioni cinetiche), la determinazione della configurazione relativa (NMR) e di quella assoluta (NMR, CD, RX). Il corso fornisce anche le conoscenze necessarie per comprendere gli effetti conformazionali, sterici e stereoelettronici sulle reazioni organiche. Alla fine del corso l'esame di casi studio ed esercitazioni in aula verteranno su analisi conformazionali e configurazionali attraverso indagini spettroscopiche NMR (tecniche mono e bi-dimensionali, esperimenti a T

variabile, ecc).

Metodi didattici

lezioni frontali

Modalità di verifica dell'apprendimento

Esame orale, durante il quale verranno verificate l'acquisizione da parte dello studente di un linguaggio stereochimico corretto, la capacità di riconoscere elementi di simmetria presenti in una molecola, assegnarne la configurazione assoluta e relativa. Inoltre verrà verificata la capacità di scegliere i metodi più adatti per la determinazione della composizione enantiomerica di una miscela e la separazione degli enantiomeri.

Programma esteso

La chiralità: dal riconoscimento molecolare alla vita di tutti i giorni. Elementi di simmetria e chiralità: molecole asimmetriche, dissimmetriche. Elementi ed operazioni di simmetria. Elementi stereogenici: centri stereogenici, assi stereogenici e piani stereogenici. Chiralità inerente. Descrittori per la chiralità centrale, assiale e planare. Molecole con centri stereogenici diversi dal C (N, P, S, Si). Molecole con più centri stereogenici. Descrittori di configurazione. Topicità. Gruppi e facce omotopici, enantiotopici e diastereotopici. Prochiralità e prostereogenicità. Desimmetrizzazione di composti achirali. Chiralità ed attività ottica: rotazione ottica specifica. Separazione di enantiomeri (risoluzione racemica). Risoluzioni cinetiche, risoluzioni cinetiche dinamiche. Metodi per la determinazione degli eccessi enantiomerici. Dicroismo circolare ed applicazione alla determinazione della configurazione assoluta di molecole organiche (casi studio) e della struttura secondaria di peptidi e proteine. Metodi RX per la determinazione della configurazione assoluta (cenni). Conformazione di sistemi aciclici, ciclici ed eterociclici. Spettroscopia NMR dinamica. Metodi NMR per la determinazione della configurazione relativa in sistemi ciclici. Costanti di accoppiamento, effetto NOE. Casi studio. Analisi conformazionali attraverso indagini spettroscopiche NMR. Casi studio: conformazione di sistemi eterociclici, conformazione di peptidi.



Testi in inglese

Italian

Elements of symmetry and chirality. Stereogenic elements. Descriptors for chirality. Prochirality and prostereogenicity. Chirality and optical activity. Racemic resolution. Kinetic resolutions and dynamic kinetic resolutions. Circular dichroism and RX methods for the determination of absolute configuration. Conformations of acyclic, cyclic, and heterocyclic systems. Dynamic NMR spectroscopy

Stereochemistry of Organic Compounds
Ernest L. Eliel, Samuel H. Wilen
ISBN: 978-0-471-01670-0
1267 pages
September 1994
Wiley

The objective of this course is to widen the knowledge of organic stereochemistry acquired by the student during the preceding cycle of study. The student will be able to recognize the chirality elements present in a molecule and assign the its configuration, to choose the best method for the determination of the enantiomeric composition of a chiral compound, the separation of enantiomers and the quantitative determination of the relative and absolute configuration.

| | |
|--|---|
| | frontal lessons |
| | Oral examination |
| | Symmetry elements and chirality: asymmetric and dissymmetric molecules. Symmetry operations. Stereogenic elements: stereogenic centers, axes and planes. Inherent chirality. Descriptors for central, axial and planar chirality. Molecules with stereogenic centers different from C (N, P, S, Si). Molecules with multiple stereogenic centers. Configuration descriptors. Homotopic, enantiotopic and diastereotopic groups and faces. Prochirality. Desymmetrization of achiral compounds. Optical activity and chirality. Racemic resolutions. Kinetic resolutions. Methods for the determination of the enantiomeric excesses (NMR, GLC, HPLC, optical rotation). Circular dichroism and application to the determination of the absolute configuration of the organic compounds and secondary structures of peptides. X-ray methods for determination of the absolute configuration of the organic compounds. Conformational analysis of acyclic and cyclic compounds. Dynamic NMR spectroscopy. |

Testi del Syllabus

Resp. Did. **GOTI ANDREA** **Matricola: 097588**

Docente **GOTI ANDREA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B016304 - STEREOSELETTIVITA' IN SINTESI ORGANICA**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2019**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/06**

Tipo Attività: **C - Affine/Integrativa**

Anno corso: **2**

Periodo: **Secondo Semestre**



Testi in italiano

Lingua insegnamento

Italiano

Contenuti (Dipl.Sup.)

Applicazioni delle reazioni organiche in sintesi stereoselettive ed asimmetriche. Composti organometallici polari. Composti organometallici covalenti. Addizione nucleofila a composti carbonilici. Reazioni di allilazione di aldeidi con allil metalli. Chimica degli enoli ed enolati. Alchilazione di enolati. Reazione aldolica diretta di derivati carbonilici e carbossilici.

Testi di riferimento

R. E. Gawley, J. Aubé, Principles of Asymmetric Synthesis, Cap. 1-5, Pergamon
E. L. Eliel, S. H. Wilen, L. N. Mander, Stereochemistry of Organic Compounds, Cap. 12, Wiley-Interscience
J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, P. Wothers, Organic Chemistry, Cap. 8, 21, 26, 27
F. A. Carey, R. J. Sundberg, Advanced Organic Chemistry, Part B, Cap. 7 e 9, Kluwer Academic/Plenum Publishers
Ch. Elschenbroich, A. Salzer, Organometallics, Cap. 1-8, VCH Publishers

Obiettivi formativi

Acquisizione dei concetti di base relativi alla interpretazione meccanicistica ed alla determinazione della stereoselettività di reazioni fondamentali in sintesi organica. Interpretazione dei dati sperimentali riguardanti la stereoselettività di reazioni organiche. Acquisizione dei concetti di base relativi alla chimica dei composti organometallici polari e covalenti.
Metodologie e procedure nell'utilizzo dei composti organometallici polari e covalenti.
Progettare sintesi organiche prevedendo e controllando la stereoselettività dei processi utilizzati. Individuazione delle opportunità e delle problematiche connesse con l'applicazione di reazioni che impiegano composti organometallici polari e covalenti nella progettazione di sintesi organiche.

| | |
|--|---|
| Prerequisiti | Insegnamenti contenenti i prerequisiti (vincolanti e/o consigliati) Corsi vincolanti: nessuno Corsi raccomandati: nessuno |
| Metodi didattici | Numero di ore relative alle attività in aula: 48. Oral final examination. There are at least 8 examination sessions, especially in February, June, July, and September. |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | Prova finale di esame: orale. Sono previsti almeno 8 appelli annuali, con numerose sessioni nei mesi di febbraio, giugno, luglio e settembre. |

| | |
|-------------------------|--|
| Programma esteso | <p>Formazione di legami carbonio-carbonio: i derivati organometallici. Classi di reattivi organometallici. Proprietà del legame M-C. Polarità e reattività. Metodi di preparazione di reattivi di Grignard e di litioalchili: sintesi diretta da alogenoderivati organici e metallo, inserzione riduttiva in legami C-S, scambio metallo-alogeno; scambio metallo-metallo, metallazione. Struttura, equilibrio di Schlenk, coordinazione, aggregazione, compatibilità con gruppi funzionali. Superbasi. Formazione di derivati di allil e benzil potassio: regioselettività e stereoselettività nelle reazioni con elettrofili. Reattività di derivati organometallici con elettrofili. Uso di litio alchili come basi per l'ottenimento di litio ammidi. CIPE (complex induced proximity effect), assistenza di gruppi vicinali (Directed ortho metalation, DoM), gruppi orientanti la metallazione (DMG). Stabilità configurazionale dei carbanioni. Sintesi enantioselettive tramite organolitio. Uso di ausiliari chirali. Deprotonazioni asimmetriche con derivati di organolitio in presenza di leganti chirali (sparteina). Utilizzo di litioammidi chirali. Composti organometallici covalenti. Organoborani. Idroborazione: regio, stereo, chemoselettività. Meccanismo dell'idroborazione, reattivi idroboranti. Selettività dei reattivi idroboranti. Preparazione di organoborani per metatesi. Reattività degli organoborani. FGI via organoborani. Ossidazione, idroammminazione, idroalogenazione. Idroborazioni enantioselettive con Ipc₂BH, IpcBH₂ e DMB. Trasformazioni di alchenilborani: protonolisi, ossidazione, alogenazione ad alogenoalcheni E e Z. Formazione di legami C-C: carbonilazione di organoborani, reazioni con α-alogeno e α-diazo esteri e chetoni, addizione coniugata a C=O α,β-insaturi. Sintesi stereocontrollate di alcheni e di alchini. Reazione di Suzuki-Miyaura. Organosilani e stannani. Preparazione per metatesi ed idrosilazione e idrostannazione. Reattività: stabilizzazione di anioni e radicali ed espansione della coordinazione, effetto β. Reattività e selettività nella reazione di alchenil, epossidi, allil silani e stannani con elettrofili. Olefinazione ed eliminazione di Peterson. Reazione di Stille: cross-coupling e coupling carbonilativo. Reazioni di derivati organometallici con composti carbonilici. Stereoselettività dell'addizione ad aldeidi e chetoni con facce diastereotopiche. Stereoselettività dell'addizione a C=O in composti aciclici: regola di Cram. Modelli di TS di Cram, di Cornforth, di Karabatsos, di Felkin. Traiettorie di Bürgi-Dunitz. Modello di TS di Felkin-Anh. Modello di Heathcock. Angolo di Flippin-Lodge. Effetto di acidi di Lewis. Modelli di TS chelato. Chetoni ciclici rigidi e non. Stereoselettività dell'addizione a cicloesanoni. Addizione di allilmetalli ad aldeidi: stereoselettività. Allilmetalli di tipo 1, 2 e 3. Stato di transizione tipo Zimmerman-Traxler ed aciclico. Enantioselettività dell'addizione di allilmetalli ad aldeidi: metodi di Brown e di Keck. Diastereoselettività semplice dell'addizione di crotilmetalli ad aldeidi. Diastereoselettività assoluta singola con aldeidi chirali o allilmetalli chirali. Diastereoselettività assoluta con doppia induzione asimmetrica. Reattività dei composti carbonilici e carbossilici. Enoli ed enolati: alchilazione, addizione aldolica diretta. Metallo enolati e loro generazione: regio e stereoselettività. Equivalenti di enoli ed enolati. Litioenolati, enolati di Na e K, sililenoletteri. Uso di enoni per la generazione specifica di enolati. Alchilazione di enolati: regio e stereoselettività. Enantioselettività dell'alchilazione di enolati: uso di ausiliari chirali. Diastereoselettività semplice nell'addizione aldolica diretta. Stati di transizione di Zimmerman-Traxler ed aperto. Stereoselettività assoluta. Singola induzione asimmetrica. Aldeidi chirali: combinazione dei modelli TS di Felkin-Anh e Zimmerman-Traxler o TS</p> |
|-------------------------|--|



Testi in inglese

| | |
|--|---|
| | Italian |
| | Selected organic reactions for stereoselective and asymmetric synthesis. Polar organometallic derivatives. Covalent organometallic derivatives. Nucleophilic addition to carbonyl compounds. Allyl metal additions to aldehydes. Enols and enolates. Alkylation of enolates. Direct aldol reaction of carbonyl and carboxyl derivatives. |
| | R. E. Gawley, J. Aubé, Principles of Asymmetric Synthesis, Chp. 1-5, Pergamon E. L. Eliel, S. H. Wilen, L. N. Mander, Stereochemistry of Organic Compounds, Chp. 12, Wiley-Interscience J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, P. Wothers, Organic Chemistry, Chp. 8, 21, 26, 27 F. A. Carey, R. J. Sundberg, Advanced Organic Chemistry, Part B, Chp. 7 e 9, Kluwer Academic/Plenum Publishers Ch. Elschenbroich, A. Salzer, Organometallics, Chp. 1-8, VCH Publishers |
| | Knowledge of the basic concepts of the reaction mechanism and stereoselectivity of key reactions for organic synthesis. Experimental data interpretation concerning the stereoselectivity of organic reactions. Knowledge of the basic concepts of the chemistry of polar and covalent organometallic derivatives. Methods and procedures in the use of polar and covalent organometallic derivatives. Organic synthesis planning with stereoselectivity prediction and control of the reactions. Understanding and foreseeing opportunities and problems of utilizing polar and covalent organometallic derivatives in organic synthesis planning. |
| | Courses to be used as requirements (required and/or recommended) Courses required: none Courses recommended: none |
| | Lectures (hours): 48. Subjects are explained with the aid of blackboard; a guide is given by projection of transparencies which are available via Moodle. |
| | Oral final examination. There are at least 8 examination sessions, especially in February, June, July, and September. |
| | C-C bond formation: organometallic derivatives. Classes of organometallics. Properties of M-C bond. Polarity and reactivity. Methods for the preparation of polar organometallic derivatives: direct synthesis, reductive insertion, metal-halogen exchange, metal-metal exchange, metallation. Structure, Schlenk equilibrium, coordination, aggregation, compatibility with functional groups. Superbases. Allyl and benzyl potassium derivatives: regio and stereoselectivity in reactions with electrophiles. Reactivity of polar organometallics with electrophiles. Alkyl lithium as bases for the preparation of lithio amides. CIPE (complex induced proximity effect), directed ortho metalation (DoM), directing metalation groups (DMG). Configurational stability of carbanions. Enantioselective syntheses with organolithium derivatives. Use of chiral auxiliaries. Asymmetric deprotonations with organolithiums and chiral ligands (sparteine). Use of chiral lithio amides. Covalent organometallic derivatives. Organoboranes. Hydroboration: regio, stereo, |

chemoselectivity. Mechanism of hydroboration, hydroboration reagents and their selectivity. Preparation of organoboranes via metathesis. Reactivity of organoboranes. FGI via organoboranes. Oxidation, hydroamination, hydrohalogenation. Enantioselective hydroborations with *lpc*2BH, *lpc*BH₂ and DMB. Transformations of alkenylboranes: protonolysis, oxidation, halogenations to E and Z alkenes. Formation of C-C bonds: carbonylation of organoboranes, reactions with α -halogen and α -diazo esters and ketones, conjugate addition to α,β -unsaturated C=O. Stereocontrolled syntheses of alkenes and alkynes. Suzuki-Miyaura reaction. Organosilanes and organostannanes. Preparation by metathesis and hydrosylation or hydrostannation. Reactivity: stabilization of anions and radicals, expansion of coordination, β effect. Reactivity and selectivity of reactions of alkenyl, epoxy, allyl silanes and stannanes with electrophiles. Peterson olefination and elimination. Stille reaction: cross-coupling and carbonylative coupling. Reactions of organometal derivatives with carbonyl compounds. Stereoselectivity of the addition to diastereotopic aldehydes and ketones. Stereoselectivity of the addition to C=O in acyclic compounds: Cram rule. TS models: Cram, Cornforth, Karabatsos, Felkin. Bürgi-Dunitz trajectory and Felkin-Anh TS model. Heathcock model. Flippin-Lodge angle. Effects of Lewis acids. Chelate TS. Rigid and non rigid cyclic ketones. Stereoselectivity of the addition to cyclohexanones. Addition of allyl metals to aldehydes: stereoselectivity. Type 1, 2 and 3 allyl metals. Zimmerman-Traxler like and acyclic TS. Enantioselectivity of the addition of crotyl metals to aldehydes: Brown and Keck methods. Simple diastereoselectivity of the addition of crotyl metals to aldehydes. Single absolute diastereoselectivity with chiral aldehydes or allyl metals. Absolute diastereoselectivity with double asymmetric induction. Reactivity of carbonyl and carboxylic derivatives. Enols and enolates: alkylation, direct aldol addition. Metal enolates: generation, regio and stereoselectivity. Equivalents of enols and enolates. Li, Na, K enolates, silyl enolethers. Use of enones for the specific generation of enolates. Alkylation of enolates: regio and stereoselectivity. Enantioselectivity of the alkylation of enolates: chiral auxiliaries. Simple diastereoselectivity in the direct aldol addition. Zimmerman-Traxler and open TS. Absolute stereoselectivity. Single asymmetric induction. Chiral aldehydes: combination of Felkin-Anh and Zimmerman-Traxler or open TS. Chelation and dipolar effects. Double asymmetric induction.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **PIERATTELLI ROBERTA** **Matricola: 098263**

Docente **PIERATTELLI ROBERTA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B016305 - STRUTTURA E REATTIVITA' DI METALLOPROTEINE**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2020**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/03**

Tipo Attività: **B - Caratterizzante**

Anno corso: **1**

Periodo: **Secondo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|--|
| Lingua insegnamento | italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Il Corso presenta la chimica delle molecole biologiche contenenti ioni metallici. Nelle prime lezioni verra' presentata una panoramica sui modi di controllo e uso degli ioni metallici nei processi biologici per arrivare poi alla descrizione della funzione e della reattività di alcune classi di molecole. Verranno anche presentati alcuni metodi di investigazione di metalloproteine. |
| Testi di riferimento | "Biological Inorganic Chemistry: Structure & Reactivity" edited by I. Bertini, H. B. Gray, E. I. Stiefel, J. Selverstone Valentine, University Science Books |
| Obiettivi formativi | Far conoscere agli studenti il ruolo degli ioni metallici in chimica biologica e in particolare la funzione di alcune classi di metallo proteine, la loro caratterizzazione strutturale e dinamica e le loro interazioni biologicamente rilevanti. Alla fine gli studenti sapranno - consultare un testo di chimica bioinorganica o letteratura specialistica, anche in inglese - individuare le tecniche di indagine più appropriate per una metallo proteina - impostare lo studio di un sistema biologico contenente ioni metallici per individuare ione metallico contenuto, leganti, tipo di coordinazione, funzione. |
| Prerequisiti | Corsi vincolanti: nessuno Corsi raccomandati: nessuno |

| | |
|--|---|
| Metodi didattici | Numero di ore relative alle attività in aula: 48 |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | L'esame prevede il superamento di una prova orale sugli argomenti trattati nel corso. Per sostenere la prova è richiesta l'iscrizione all'esame sul sito web della didattica abilitato alla verbalizzazione elettronica. La lista viene chiusa due giorni prima della data di appello. |
| Programma esteso | La Tavola Periodica e le Scienze della Vita; Gli ioni metallici nel mondo "omico"; Insufficienza, omeostasi, tossicità; Proteine e ioni metallici (qualche esempio); Cofattori metallici speciali; I fattori che regolano i potenziali di riduzione; Proteine di trasferimento elettronico; Trasportatori di O ₂ e altre piccole molecole; Attivatori dell'O ₂ ; Dismutasi e reduttasi; Monossigenasi e diossigenasi; Perossidasi; Idrolasi; Peptidasi; Sensori; Proprietà spettroscopiche di alcune classi di proteine; Principali tecniche di indagine. |



Testi in inglese

| | |
|--|---|
| | italian |
| | The course gives insights on the chemistry of metal-containing molecules. It starts with an overview on the control and use of metal ions in biochemical processes and arrives at the description of some classes of molecules containing metal ions. Examples on spectroscopic applications to metalloproteins are also given. |
| | "Biological Inorganic Chemistry: Structure & Reactivity" edited by I. Bertini, H. B. Gray, E. I. Stiefel, J. Selverstone Valentine, University Science Books |
| | To introduce students to the study of metal ions in biological chemistry, and especially the role of some classes of metalloproteins, their structural and dynamic characterization and their biologically relevant interactions. At the end, students should be able to <ul style="list-style-type: none"> - consult a bioinorganic chemistry text or specialized literature in the field, in English - identify the investigation techniques most appropriate for a metalloprotein - setting the study of a biological system containing metal ions to identify the type of metal ions, their ligands, type of coordination, role. |
| | Courses required: none Courses recommended: none |
| | Total number of hours for Lectures (hours): 48 |
| | Oral examination on the topics presented during the classes. |
| | The Periodic Table in the Life Sciences; Metal ions in a "omic" world; Transport and storage of metal ions in biology; Metal ions and proteins: Binding, stability, and folding; Special cofactors and metal clusters; Electron-transfer proteins; Electron transfer through proteins; Carriers of dioxygen and other small molecules; Dioxygen activating enzymes; Dismutases and reductases; Mono-oxygenases and di-oxygenases; |

Testi del Syllabus

| | | |
|-------------------|--|--------------------------|
| Resp. Did. | PICCIOLI MARIO | Matricola: 095488 |
| Docenti | PICCIOLI MARIO, 3 CFU TOTTI FEDERICO, 3 CFU | |
| Anno offerta: | 2020/2021 | |
| Insegnamento: | B012841 - STRUTTURA ELETTRONICA E PROPRIETA' MOLECOLARI | |
| Corso di studio: | B088 - SCIENZE CHIMICHE | |
| Anno regolamento: | 2020 | |
| CFU: | 6 | |
| Settore: | CHIM/03 | |
| Tipo Attività: | B - Caratterizzante | |
| Anno corso: | 1 | |
| Periodo: | Primo Semestre | |



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|---|
| Lingua insegnamento | italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Struttura elettronica e legame chimico. Controllo elettronico della configurazione nucleare: vibrazioni e accoppiamento vibronico. Metodi fisici per lo studio della struttura elettronica. Stereochimica e strutturistica chimica. Reazioni di trasferimento elettronico. Proprietà redox. Effetti elettro-conformazionali. Reattività e catalisi. |
| Testi di riferimento | "Electronic Structure and Properties of Transition Metal Compounds", Isaac Bersuker, Wiley-Interscience 1996; "Transition Metal Chemistry", M. Gerloch and E.C Constable, VCH, 1994; "Orbital Interactions in Chemistry", T.A. Albright. J.K. Burdett, and M-H Whangbo Wiley-interscience 1985; "Physical Methods for Chemists", R.S. Drago, Saunders College Publishing, 1992 |
| Obiettivi formativi | Lo studente sarà in grado di interpretare in termini di struttura elettronica gli spettri ottenuti con le varie tecniche studiate relativi a sistemi contenenti metalli di transizione e di fare previsioni sulla reattività molecolare di questi ultimi. Lo studente avrà una visione generale sulla teoria delle proprietà strutturali ed elettroniche dei composti di coordinazione di metalli di transizione consentendogli di progettare la caratterizzazione di un nuovo sistema attraverso le metodologie teoriche e pratiche descritte nel corso. |
| Prerequisiti | Corsi vincolanti: nessuno Corsi raccomandati: Chimica Fisica II e Chimica Inorganica |
| Metodi didattici | Numero di ore relative alle attività in aula: 48 |

| | |
|--|--|
| Modalità di verifica dell'apprendimento | Esame orale. |
| Programma esteso | <p>1.Struttura elettronica e Legame Chimico 1.1 Ruolo degli elettroni d e f nel legame di coordinazione 1.2 Configurazioni elettroniche e aspetti qualitativi correlati 1.3 Leganti: legami 1.4 Energie, Geometrie e Distribuzioni di Carica 1.5 Effetti Relativistici</p> <p>2. Controllo elettronico della configurazione nucleare: Vibrazioni e accoppiamento Vibronico 2.1 Vibrazioni molecolari 2.2 Accoppiamento Vibronico 2.3 Effetto Jahn-Teller</p> <p>3. Metodi fisici per lo studio della struttura elettronica 3.1 Spettri elettronici 3.2 Transizioni d-d 3.3 Spettri fotoelettronici nell'Ultravioletto e a Raggi-X 3.4 Proprieta' magnetiche 3.5 Determinazione della Densita' elettronica e di spin</p> <p>4.Stereochimica e Strutturistica Chimica 4.1 Modelli Semiclassici 4.2 Stereochimica vibronica 4.3 Influenza tra Leganti 4.4 Stereochimica nello stato solido</p> <p>5. Trasferimento elettronico. Proprieta' Redox. Effetti elettroconformazionali 5.1 Trasferimento elettronico e di carica dovuto alla coordinazione 5.2 Traferimento Elettronico in sistemi a Valenza Mista</p> <p>6. Reattivita' e Catalisi 6.1 Fattori Elettronici nella Reattivita' 6.2 Controllo Elettronico nell'Attivazione Chimica via accoppiamento Vibronico 6.3 Calcolo diretto delle Barriere Energetiche delle Reazioni Chimiche</p> |



Testi in inglese

| | |
|--|---|
| | italian |
| | Electronic structure and Chemical bond. Electronic control of nuclear configuration:easyjet vibrations and vibronic coupling. Electronic structure investigated by Physical methods. Stereochemistry and Crystal Chemistry. Electron Transfer, Redox properties, and Electron-Conformational effects. Reactivity and Catalysis. |
| | "Electronic Structure and Properties of Transition Metal Compounds", Isaac Bersuker, Wiley-Interscience 1996; "Transition Metal Chemistry", M. Gerloch and E.C Constable, VCH, 1994; "Orbital Interactions in Chemistry", T.A. Albright. J.K. Burdett, and M-H Whangbo Wiley-interscience 1985; "Physical Methods for Chemists", R.S. Drago, Saunders College Publishing, 1992 |
| | The student will be able to interpret the spectra obtained with the several techniques of investigation on the basis of the electronic structure of the metal complexes under study. The student will be able to make expectations on their reactivity. At the end of the course the student will have a general view on the theory of the structural and electronic properties of coordination compounds containing transition metal ions. The student will be able to design characterization strategies for new systems. |
| | Courses required: none |
| | Courses recommended: Physical Chemistry II and Inorganic Chemistry |
| | Total number of hours for Lectures (hours): 48 |
| | Oral exam. |

1. Electronic Structure and the Chemical Bond 1.1 Role of d and f electrons in the coordination bond 1.2 Electronic Configurations and related qualitative aspects 1.3 Ligands: bond 1.4 Energies, geometries and Charge distributions 1.5 Relativistic effects

2. Electronic Control of the nuclear configuration: Vibrations and Vibronic coupling 2.1 Molecular Vibrations 2.2 Vibronic Coupling 2.3 Jahn-Teller Effect

3. Electronic Structure Investigated by Physical Methods 3.1 Electronic Spectra 3.2 d-d Transitions 3.3 X-ray and Ultraviolet 3.4 Magnetic Properties 3.5 Determination of Electron Charge and Spin Density

4. Stereochemistry and Crystal Chemistry 4.1 Semiclassical model 4.2 Vibronic Stereochemistry 4.3 Mutual influence of Ligands 4.4 Crystal Stereochemistry

5. Electron Transfer. Redox Properties and Electron-Conformational Effects 5.1 Electron Transfer and Charge Transfer 5.2 Electron Transfer in Mixed-Valence Compounds

6. Reactivity and catalytic Action 6.1 Electronic Factors in Reactivity 6.2 Electronic Control of Chemical Activation via Vibronic Coupling 6.3 Direct Computation of Energy Barriers of Chemical Reactions

Testi del Syllabus

Resp. Did. **BAZZICALUPI CARLA** **Matricola: 097406**

Docente **BAZZICALUPI CARLA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B012701 - STRUTTURISTICA CHIMICA**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2019**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/03**

Tipo Attività: **C - Affine/Integrativa**

Anno corso: **2**

Periodo: **Primo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|--|
| Lingua insegnamento | italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | L'insegnamento fornisce le definizioni di base di stato cristallino, delle leggi che lo regolano e delle tecniche sperimentali di tipo diffrattometrico che ne consentono lo studio. In particolare, saranno trattate la diffrazione a raggi X su cristallo singolo, con riferimento sia a campioni macromolecolari che non, e da campioni microcristallini. Le competenze saranno acquisite anche svolgendo esercitazioni pratiche su specifici argomenti trattati nel corso. |
| Testi di riferimento | Indicati all'inizio del corso. |
| Obiettivi formativi | Scopo primario dell'insegnamento è l'avvicinamento degli studenti alla chimica strutturale, settore delle scienze chimiche fondamentale nello studio della natura e delle proprietà dei composti chimici. Al termine del corso gli studenti conosceranno simboli e definizioni proprie della cristallografia ed i più comuni metodi di utilizzo del dato diffrattometrico nell'analisi strutturale. Acquisire la capacità di analisi di una struttura cristallina per l'individuazione dei parametri reticolari. Saper analizzare delle interazioni interatomiche ed intermolecolari presenti nel cristallo. |
| Prerequisiti | Corsi vincolanti: nessuno Corsi raccomandati: nessuno |
| Metodi didattici | Numero di ore relative alle attività in aula: 48 |

| | |
|--|---|
| Altre informazioni | Orario di ricevimento: lunedì 11-13 previo appuntamento |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | Esame orale. |
| Programma esteso | Saranno fornite le informazioni basilari sullo stato cristallino, sulle leggi che lo regolano e sulle principali tecniche sperimentali che ne consentono lo studio. Durante il corso potranno essere approfonditi alcuni argomenti di interesse cristallografico, fra cui crystal-engineering e MOFs (metal-organic frameworks), polimorfismo, predizione strutturale, utilizzo del Cambridge Structural Database. Esercitazioni mirate impegneranno lo studente in prima persona consentendogli una possibilità di verifica ed approfondimento degli argomenti studiati. |



Testi in inglese

| | |
|--|---|
| | italian |
| | The course includes teaching on basic concepts and methods in structural chemistry particularly within the areas of X-ray crystallography and the interpretation and evaluation of results obtained by structure determinations. Interactive data bases for finding structural data and proper literature references are also utilised. Lectures, experimental work and exercises are integrated during the course. |
| | Textbooks are indicated at the beginning of the course. |
| | Main targets are a basic knowledge of solid state symmetry properties and of the basic concept for structure determination from diffraction data and the analysis of the obtained structural data. Ability to understand and interact correctly with the information present in literature structural reports, with an understanding of the quality and possible limitations of those reports. Skills acquired (at the end of the course): Ability to employ symmetry operators in the description and study of structures with particular focus on the study of intermolecular and interatomic interactions. |
| | Courses required: none Courses recommended: none |
| | Contact hours for: Lectures (hours): 48 |
| | Consulting hours: Monday 11-13 am on demand |
| | Oral final exam. |

Symmetry properties of crystalline solids: crystal lattice, unit cell and crystallographic systems, reciprocal lattice. Symmetry point groups and crystal classes, space groups; application to the study of literature structure reports. Concepts of crystal-engineering and MOFs (metal-organic frameworks), polymorphism and structural prediction, Structural Database.

Testi del Syllabus

Resp. Did. **ROSI LUCA** **Matricola: 098932**

Docente **ROSI LUCA, 6 CFU**

Anno offerta: **2020/2021**

Insegnamento: **B029101 - VALORIZZAZIONE INDUSTRIALE DI RIFIUTI**

Corso di studio: **B088 - SCIENZE CHIMICHE**

Anno regolamento: **2019**

CFU: **6**

Settore: **CHIM/04**

Tipo Attività: **C - Affine/Integrativa**

Anno corso: **2**

Periodo: **Primo Semestre**



Testi in italiano

| | |
|------------------------------|---|
| Lingua insegnamento | Italiano |
| Contenuti (Dipl.Sup.) | Principi di bioeconomia. Trattamenti meccanici per la selezione di rifiuti di plastica Processi termochimici su rifiuti di plastica e biomassa residua: pirolisi, gassificazione. Processi chimici sui rifiuti: idrolisi, glicolisi, alcolisi. Metodi di caratterizzazione dei prodotti di pirolisi da biomassa |
| Testi di riferimento | Si fa riferimento al materiale didattico fornito dal docente. Ad integrazione il docente raccomanda paper scientifici su argomenti specifici |
| Obiettivi formativi | il corso di propone di presentare le principali metodologie meccaniche, chimiche e termochimiche per la valorizzazione di plastiche a fine e biomasse di scarto, attraverso la produzione di fuel o chemicals. |
| Prerequisiti | Conoscenze di base di chimica Organica e chimica dei materiali polimerici |
| Metodi didattici | Le lezioni frontali prevedono l'utilizzo di "slides" che verranno fornite agli studenti per mezzo dell'applicativo Moodle . Il docenti inoltre discuterà in aula alcuni articoli scientifici relativi alla letteratura di settore, con lo scopo di approfondire attraverso lo studio di importanti case studies gli argomenti trattati nel corso. |
| Altre informazioni | Per qualsiasi informazione è possibile rivolgersi direttamente il docente. luca.rosi@unifi.it Oppure: ricevimento il giovedì dalle 10:30 alle 12:30 presso lo studio del docente (dipartimento di chimica, stanza 21) |

Modalità di verifica dell'apprendimento

L'esame finale consiste in un colloquio alla lavagna con domande strettamente pertinenti al programma. Si lascia la possibilità agli studenti di perfezionare l'apprendimento con la presentazione di una breve tesina su un case study di loro interesse.

Programma esteso

Il corso proposto affronta, parzialmente, alcune tematiche tipiche degli insegnamenti dei corsi di ingegneria sanitaria ambientale, ma con un taglio esclusivamente di natura Chimica. In tale ambito, dopo classificazione dei rifiuti secondo la normativa vigente e la discussione dei principi alla base della cosiddetta "Economia circolare" (con riferimento alle direttive europee), il corso prende specificatamente in esame la valorizzazione attraverso i trattamenti ad oggi in essere, dei rifiuti costituiti da materie plastiche e le biomasse, soprattutto di scarto. Gli impianti sono accennati mentre si approfondiscono le reazioni chimiche coinvolte nei processi di trattamento discussi. Una sezione del corso è specificatamente dedicata ai metodi di caratterizzazione dei prodotti ottenuti dalla pirolisi di biomasse. Conclude il corso la presentazione di un case study: pirolisi per la produzione di fuel da pneumatici fuori uso/processo integrati di bioraffineria.



Testi in inglese

| | |
|--|---|
| | Italian |
| | bioeconomy: an introduction. mechanical treatment for sorting of plastic waste thermochemical processes on plastic waste and residual biomass: pyrolysis, gasification. Chemical processes on waste: hydrolysis, glycolysis, alcoholysis. Methods of characterization of pyrolysis products from biomass |
| | Slides provided by the teacher by means Moodle application |
| | Familiarity with the main mechanical, chemical and thermochemical methods for the treatment of end of life plastics and residual biomass, devoted to the production of fuel or chemicals. |
| | General Chemistry, Basic Organic, and polymers. |
| | The "slides" will be provided to students through the Moodle application. Some scientific articles dealing with case study will be discussed in class together with the students. |
| | For any further information it is possible to contact the teacher directly: luca.rosi@unifi.it |
| | The final exam consists of an interview with open questions. The student has the opportunity to present a brief review about a case study of his interest. |
| | After having classified the waste according to the current legislation and the discussion of the principles underlying the so-called "circular economy" (with reference to the European directives), the course specifically examines the current treatments of waste consisting of plastic materials and biomass in order to their valorisation. Plans are mentioned while the chemical reactions involved in the treatment processes discussed are studied in depth. A section of the course is specifically dedicated to the characterization |

methods of the products obtained from the biomass pyrolysis.
The course concludes with the presentation of a case study: pyrolysis for the production of fuel from tires out of use / integrated biorefinery process.

Annex B
COURSES AVAILABLE AT UNIFI

For the Double degree any of the following courses can be selected

**Master Degree in Advanced Molecular
Sciences (B234) in Chemical Sciences
(class LM-54), School of Mathematical,
Physical, and Natural Sciences**

| | |
|--|---|
| Mandatory Courses | 2 |
| B029585 - ADVANCED AND INNOVATIVE ANALYTICAL METHODS FOR APPLICATIONS IN LIFE SCIENCES | 2 |
| B029587 - ADVANCED COORDINATION CHEMISTRY | 3 |
| B029593 - ADVANCED SYNTHETIC METHODS..... | 3 |
| B029592 - PROTEIN ENGINEERING AND RECOMBINANT PROTEINS..... | 3 |
| B029589 - COMPUTATIONAL MODELLING OF COMPLEX SYSTEMS..... | 4 |
| B029590 - EXPERIMENTAL METHODS FOR THE STUDY OF NANOSTRUCTURED MATERIALS..... | 4 |
| B029586 - METHODS AND MATERIAL FOR CULTURAL HERITAGE CONSERVATION | 5 |
| B029594 - METHODS FOR DECORATION OF MATERIALS AND BIOCONJUGATION..... | 5 |
| B029591 - SOFT MATTER MATERIALS | 6 |
| B029588 - SUPERSTRUCTURES AND MULTI-COMPONENTS ARCHITECTURES IN LIFE AND MATERIAL SCIENCES | 6 |
| Optional courses..... | 7 |
| B029597 - ADVANCED POLYMERIC MATERIALS..... | 7 |
| B029599 - CHEMICAL BIOTECHNOLOGY | 7 |
| B029598 - CHEMISTRY AND THE OMIC SCIENCE..... | 8 |
| B029596 - MEDICINAL CHEMISTRY | 8 |
| B029600 - SOFT MATTER MATERIALS APPLIED TO DRUG DELIVERY SYSTEMS, FOOD SUPPLEMENTS AND COSMETIC SCIENCES | 8 |
| B029595 - SOLID STATE AND MATERIAL CHEMISTRY | 9 |
| Other Activities..... | 9 |
| B029646 - FINAL EXAMINATION: EXPERIMENTAL WORK | 9 |
| B029647 - FINAL EXAMINATION: WRITING AND DISCUSSION..... | 9 |
| B029648 – TRAINEESHIP..... | 9 |

Sommario

| | |
|--|---|
| Mandatory Courses | 2 |
| B029585 - ADVANCED AND INNOVATIVE ANALYTICAL METHODS FOR APPLICATIONS IN LIFE SCIENCES | 2 |
| B029587 - ADVANCED COORDINATION CHEMISTRY | 3 |
| B029593 - ADVANCED SYNTHETIC METHODS..... | 3 |
| B029592 - PROTEIN ENGINEERING AND RECOMBINANT PROTEINS..... | 3 |
| B029589 - COMPUTATIONAL MODELLING OF COMPLEX SYSTEMS..... | 4 |
| B029590 - EXPERIMENTAL METHODS FOR THE STUDY OF NANOSTRUCTURED MATERIALS..... | 4 |
| B029586 - METHODS AND MATERIAL FOR CULTURAL HERITAGE CONSERVATION | 5 |
| B029594 - METHODS FOR DECORATION OF MATERIALS AND BIOCONJUGATION..... | 5 |
| B029591 - SOFT MATTER MATERIALS | 6 |
| B029588 - SUPERSTRUCTURES AND MULTI-COMPONENTS ARCHITECTURES IN LIFE AND MATERIAL SCIENCES | 6 |
| Optional courses..... | 7 |
| B029597 - ADVANCED POLYMERIC MATERIALS..... | 7 |
| B029599 - CHEMICAL BIOTECHNOLOGY | 7 |
| B029598 - CHEMISTRY AND THE OMIC SCIENCE..... | 8 |
| B029596 - MEDICINAL CHEMISTRY | 8 |
| B029600 - SOFT MATTER MATERIALS APPLIED TO DRUG DELIVERY SYSTEMS, FOOD SUPPLEMENTS AND COSMETIC SCIENCES | 8 |
| B029595 - SOLID STATE AND MATERIAL CHEMISTRY | 9 |
| Other Activities..... | 9 |
| B029646 - FINAL EXAMINATION: EXPERIMENTAL WORK | 9 |
| B029647 - FINAL EXAMINATION: WRITING AND DISCUSSION..... | 9 |
| B029648 – TRAINEESHIP..... | 9 |

Mandatory Courses

B029585 - ADVANCED AND INNOVATIVE ANALYTICAL METHODS FOR APPLICATIONS IN LIFE SCIENCES

Teachings of First year – Semester 1; Teaching Term: September – December; 6 ECTS. Teaching Hours: 56

Course Content: The course deals with advanced analytical techniques and innovative methodologies for applications in the life sciences. The following contents will be covered: Sampling and Sample treatment. Statistics for analytical measurements. Clinical analytical chemistry: consideration on accurate results and how to get good analytical performances. Bioelectrochemistry. Bioanalysis. Innovative diagnostic tools. Selected laboratory experiments.

Course program: Analytical workflow in life sciences: from sample preparation and treatment to data acquisition and analysis. Analytical technologies and methodologies in the field of "omics" research: advanced mass spectrometric procedures and techniques, innovative hyphenated techniques, advanced high throughput

techniques. Bioelectrochemical methods in life sciences. Innovative diagnostics and POC (Point of Care) analytical tools. Innovative materials for analytical chemistry. Laboratory activities.

B029587 - ADVANCED COORDINATION CHEMISTRY

Teachings of First year – Semester 1; Teaching Term: September – December; 6 ECTS. Teaching Hours: 48

Course Content: The course aims at providing the fundamental competences to understand the coordination bond and its effect on electronic and structural properties of compounds containing transition elements and lanthanoids. The student is expected to gain the ability to correlate the molecular and electronic structure to a wide range of properties of relevance for diversified applications in life sciences and material sciences.

Course program: The lectures will cover basic concepts of symmetry, multielectron atoms, term symbols, crystal field theory, molecular orbital theory, vibronic coupling, mixed valence systems. The most widely employed techniques for the characterization of coordination compounds will be presented: Optical spectroscopies (UV-vis, IR and Raman); resonance techniques (NMR, EPR). Reactivity of coordination compounds (inert and labile compounds, mechanisms of substitution, redox processes, etc). Transition elements and lanthanoids in material sciences: luminescent molecular materials, materials for light harvesting, materials for selective gas storage, molecular switches, materials for information storage and processing. Transition metal ions in biological systems, roles of metal ions in the origin of life on earth, occurrence of metal ions in different living species, metals and nucleic acids, metalloproteins and metalloenzymes, correlation between electronic structure and biological function. Transition metals and lanthanoids as versatile probes for structural investigation and theranostic applications.

B029593 - ADVANCED SYNTHETIC METHODS

Teachings of First year – Semester 1; Teaching Term: September – December; 6 ECTS. Teaching Hours: 56

Course Content: The aim of the course is the description of advanced synthetic methods used for the production of intermediates, natural substances, biologically active molecules. **Topics:** Methods for the activation of the C-H bond; organocatalysis; photocatalysis; solid phase strategies for the synthesis of peptides and oligosaccharides; strategies for the macrocyclization of peptides for the stabilization of bioactive conformations; purification and characterization strategies.

Course program: Aims: The aim of the course is the description of advanced synthetic methods used to produce intermediates, natural and modified biologically active molecules. The most important modern synthetic strategies will be presented covering classical solution and solid-phase strategies applied to peptides, proteins, and saccharides.

Lectures: Modern synthetic methods for the formation of C-C bond: metathesis of alkenes and alkynes, cross coupling reactions, enantioselective aldol condensations, stereoselective synthesis. Synthetic methods for C-H bond activation. Principles and applications to organocatalysis. and photocatalysis. Solid-phase strategies for the synthesis of peptides and oligosaccharides: orthogonal protecting and activating groups. Strategies for macrocyclization to stabilize bioactive conformations, such as stapled peptides (dicarba- and clicked peptides, etc.) for biomedical applications (R&D of peptide drugs and diagnostics) and development of biomimetic materials. Ligation strategies to implement the convergent assembly of complex peptides (i.e., glycopeptides, phosphopeptides, etc): from oligopeptides to co- and post-translationally modified proteins, such as glycoproteins (native and aberrant). Semi-synthetic strategies to obtain homogeneous glycoproteins using specific enzymes. Efficient purification and characterization strategies.

Laboratory practice: each student will choose one of the following activities that will be performed in a research laboratory. Use of organocatalysis for the preparation of bioactive molecules. Use of photocatalysis for the preparation of synthetic intermediates. Preparation of monomers for the production of materials for energy through the formation of C-C bond and C-H activation. Synthesis of a modified peptide (glyco, lipo, phosphopeptides) and development of ligation strategies to obtain homogenous complex proteins also by semi-synthetic strategies.

B029592 - PROTEIN ENGINEERING AND RECOMBINANT PROTEINS

Teachings of First year – Semester 1; Teaching Term: September – December; 6 ECTS. Teaching Hours: 48

Course content: Biological function of proteins and their biochemical features. Protein structures. Biotechnology applications of protein structure and function relationship: analysis of protein-protein interactions, protein-ligand, enzyme of industrial interest, drug design. Production of recombinant proteins.

Purification of proteins with chromatographic techniques. Examples of recombinant proteins for therapeutics and industrial applications.

Course program: After an introduction on protein structure, their structural classification and synthesis (concerning mechanism and regulation), the course will describe post-translational modifications, protein targeting (membrane, mitochondria, nucleus), protein folding and protein degradation (lysosomal system, autophagy). The course will then focus on the knowledge of the various techniques applied in protein engineering with biotechnological applications: planning from scratch of protein structures, rational design of new functions, molecular modelling, and docking, mutagenesis (site-directed and random), as well as, isolation methods of function-optimized protein variants. Various methods of expression of recombinant proteins will be discussed, presenting the pro and cons of the different approaches to the modification of protein properties and of the various systems for the heterologous expression. The course will end with a review of the therapeutic applications of recombinant proteins and their use in industry. Some case studies will be presented.

B029589 - COMPUTATIONAL MODELLING OF COMPLEX SYSTEMS

Teachings of First year – Semester 2; Teaching Term: February – June; 6 ECTS. Teaching Hours: 56

Course Content: Molecular dynamics simulations of complex systems. Advanced simulation techniques with enhanced sampling. The non equilibrium approach. Alchemical technologies for binding affinities in host-guest systems.

Course program: Computational methods are currently of paramount importance to understand the properties of complex systems. This course is aimed at training students on modern computational methods and computational tools. The students will be able to understand the approximations that underpin these methods, the accuracy that can be achieved, and to compare the results with experimental data. During the case-study sessions, students will be also trained in the use of the new HPC (High Performance Computing) resources of the University of Florence, which will be operative in the early months of 2019.

Lectures: Introduction, Computation of thermodynamic, kinetic and spectroscopic parameters. Quantum mechanical (QM) approaches: accuracy vs. feasibility. Molecular mechanics (MM) and molecular dynamics: the problem of transferability. QM/MM: the best of two worlds. What about boundaries? Beyond atomistic approaches: coarse graining and continuum models. Advanced enhanced simulation techniques. Case studies: nanostructures and soft matter.

B029590 - EXPERIMENTAL METHODS FOR THE STUDY OF NANOSTRUCTURED MATERIALS

Teachings of First year – Semester 2; Teaching Term: February – June; 6 ECTS. Teaching Hours: 56

Course content: Theory and laboratory practice of techniques for the characterization of nanostructured materials. Microscopy: Optical microscopy and contrast techniques; Fluorescence and Confocal Microscopy; Super-resolution microscopy; Scanning and Transmission Electron Microscopy (SEM, TEM); Atomic Force Microscopy (AFM). Static and Dynamic Scattering: X-Rays, Neutrons, Light. Four laboratory practices: Confocal Microscopy, TEM and SEM, AFM, X-Ray Scattering.

Course program: Aim of this course is to train students on modern characterization techniques for nanostructured materials in solution, from biological macromolecules and synthetic polymers, to nanoparticles and self-assemblies. The students will learn the basic theoretical principles underpinning experimental methods in direct and indirect space and will receive hands-on laboratory training on microscopic and scattering methods, including those studied and prepared in other courses.

Concerning the experimental facilities, these will include those already available in the Dept and the new Cryo-EM, whose purchase had been funded by the “Dipartimento di Eccellenza” call.

Lectures: Direct Observation Techniques: Optical Microscopy: a) Basics: The compound microscope; Image formation and Illumination paths in the compound microscope; Diffraction and interference in the microscope; Resolution; b) Contrast Techniques: Bright and Dark Field Microscopy; Phase Contrast; Fluorescence Microscopy; Confocal Microscopy; Super-resolution microscopy; Applications: Colloids, Polymers, Biological Systems. Electron Microscopy: a) Electron Optics: Electrostatic and magnetic lenses; b) Transmission Electron Microscopy (TEM): Components of a TEM microscopy; Elastic and inelastic electron scattering; Contrast principles in TEM; Specialized techniques; Applications: Colloids, Polymers, Biological Systems. Scanning electron microscope (SEM): Components of a SEM microscope; SEM modes: secondary emission and backscattering; Applications: Colloids, Polymers, Biological Systems Atomic Force Microscopy (AFM): Components: Tip, Cantilever, Detector, Feedback mechanism; Topography: Contact and Non-contact modes; Force Measurements: Force-indentation curves, Elasticity, Microrheology; Additional operation modes. Applications: Colloids, Polymers, Biological Systems. Indirect Methods: Scattering. Fundamentals; Radiation-Matter interaction and Contrast; Radiations: X-Rays, Light, Neutrons. Static Scattering: Structural Properties.

System with a discrete number of scatterers: Dilute Systems: Form Factor; Concentrated Systems: Interactions and Structure Factors; Length Scales and Scattering Vector; Ordered and Disordered Systems, Specialized Setups. Applications: Colloids, Polymers, Biological Systems

Laboratory practice: Microscopy: 1) Structure and dynamics of a colloidal dispersion using Confocal Microscopy. 2) TEM and SEM investigation of colloidal and biological samples. 3) Surface topography with the Atomic Force Microscope Scattering: 4) Determination of a colloidal form factor and structure factor using Small Angle X-Ray Scattering.

B029586 - METHODS AND MATERIAL FOR CULTURAL HERITAGE CONSERVATION

Teachings of First year – Semester 2; Teaching Term: February – June; 6 ECTS. Teaching Hours: 56

Course Content: This course will focus on the basic principles of chemical sciences that underlie modern chemical and material technologies for the understanding of degradation and the design of conservative materials for works of art.

Topics: A work of art from a chemical-physical point of view; detergency; cleaning systems; confining cleaning systems in macromolecular scaffolds; selected examples of gels as scaffolds; case studies

Course program: This course will focus on the basic principles of chemical sciences that underlie modern chemical and material technologies for the understanding of degradation and the design of conservative materials for works of art; building on this basic knowledge, the students will apply such principles to solve some selected issues related to conservation science, which can be promptly translated to a broad range of challenges in academic and non-academic fields.

Lectures (4 ECTS)

What is a work of art from a chemical-physical point of view; Degradation and conservation of works of art; Principles of surface chemistry, self-assembly and soft matter related to cultural artifacts and materials for conservation.

Detergency.

Advanced systems for conservation; Cleaning systems: Micelles, microemulsion and more complex fluids; Confining cleaning systems in macromolecular scaffolds: Gels; Gel Definition and Gel Classes (physical and chemical gels); Hydrogels and Organogels; Hybrid Gels Gels Advanced Architectures (SIPN, IPN, DS, SCL) General Properties of Polymer Networks; Background on Entropic Elasticity; Elasticity of Physical Gels; Glass transition; Network Swelling; Swelling and Biodegradation; Transport phenomena in gels; Thermally Induced Phase Separation (TIPS) with Solvent Crystallization: Cryogels; Spinodal Decomposition in Ternary Systems: Polymer/Solvent/Non-Solvent; Spinodal Decomposition in Organic – Inorganic Composite Scaffolds; Supercritical Processing.

Selected Examples of Gels as Scaffolds: pHEMA and PVA based hydrogels Castor oil Organogels

Confining a complex system (micelle, microemulsion, etc.) into a gel to boost activity and fine control of the confined system. Case studies: cleaning of Leonardo da Vinci, Pollock, Picasso, De Chirico, etc.

Laboratory practice (2 ECTS)

B029594 - METHODS FOR DECORATION OF MATERIALS AND BIOCONJUGATION

Teachings of First year – Semester 2; Teaching Term: February – June; 6 ECTS. Teaching Hours: 56

Course content: Chemical functionalization of haptens, antigens and antibodies with suitable linkers for the decoration of carrier proteins or nanomaterials (peptides, dendrons, nanoparticles). Methods for the preparation of metal and organic nanoparticles in physiological media. Currently used strategies for the bioconjugation of haptens, antigens and antibodies to selected carriers and applications of bioconjugated materials in theranostics.

Course program: The students will be introduced to the chemical functionalization of haptens, antigens and antibodies for the decoration of proteins or nanomaterials (peptides, dendrons, silica nanoparticles, metal nanoparticles). Characterization of the armed, selected haptens. Descriptions of the strategies currently used for the bioconjugation of different antigens to a selected carrier. Bifunctional linkers, how choosing the more convenient. Explaining how the linkers can be grafted to the hapten, antigens and antibodies.

Methods for the preparation of metal and organic nanoparticles in physiological media. Strategies for the bioconjugation of nanomaterials, incorporation of bioactive compounds (genetic material, drugs, haptens, antigens, antibodies), development of specific probes (imaging agents, MRI-active agents, synthetic antigens, radionuclides, optical probes etc).

Main strategies requiring specific and selective technologies at the interface between organic chemistry and materials science. Modern applications in biomedicine: therapy (vaccines, novel antimicrobial agents, gene

delivery, phototherapy, smart release of drugs etc..) and diagnostics (anti-drug and anti-synthetic antigen antibodies, molecular imaging, etc).

Lectures: Methods for the functionalization of haptens, antigens, antibodies: suitable protections for a convenient activation. Methods for multi-haptens and antigens presentation: orthogonal activation of different epitopes. Methods for the synthesis, characterization and purification of bifunctional linkers suitable for biocompatible reactions. Methods for the preparation of stable dispersions of gold nanoparticles in biocompatible media. The example of glyconanotechnology. Biofunctionalization, bioconjugation and characterization of the nanomaterials. Application of bionanomaterials in biomedicine (theragnostic).

Laboratory practice: Synthesis, purification and characterization of bifunctional linkers. Functionalization of a hapten/epitope of biological relevance with the thiol-ending linker. Preparation of gold nanoparticles of different size in water. Conjugation of the thiol-ending biomolecules to the nanoparticles. Incorporation of bioconjugated gold nanoparticles into hydrogels for smart release (enzyme and pH-dependent). Characterization of biomolecule-conjugates by modern techniques (TEM, DLS, AFM, cryo-TEM, protein adsorption/protein corona, NMR, UV etc..).

B029591 - SOFT MATTER MATERIALS

Teachings of First year – Semester 2; Teaching Term: February – June; 6 ECTS. Teaching Hours: 48

Course content: This course focuses on the understanding of the physical chemistry of soft matter, from the interactions at the nanoscale the stability at the macro scale. The properties of soft materials will be presented and discussed in relation to some examples from Nature, to learn the principles to design bio-inspired soft materials. All topics will be treated from a highly multidisciplinary perspective, allowed by the central role of the molecular sciences in the soft matter science.

Course program: This course will focus on the theoretical understanding of the physical chemistry of soft condensed matter, from the interactions at the nanoscale to soft materials dynamics and stability on the macro scale. The student is expected to understand the phase behavior, stability and main properties of soft matter. Recognize everyday examples of soft matter systems and use concepts learnt in the course to understand the behavior of such systems. Obtain the main theoretical guidelines and the most important perspectives into practical applications where soft materials are relevant. The properties of nanomaterials will be presented and discussed in relation to some biological complex systems. For example: the Lotus effect, the shark skin and the nanostructure of some outer biological surfaces in relation to interfacial properties, contact angle, wettability, detergency and biofouling prevention. Natural gel-like materials and the local controlled delivery of drugs. The special rheology of some natural fluids and the behavior of some daily life products. All topics are necessarily multidisciplinary and will include many examples of everyday phenomena.

The course will include guided self-study, lectures given by the course teacher and by invited international experts, final oral exam.

Lectures: After a preliminary short theoretical introduction to the concepts related to surfactants, self-assembly and nanoparticles, the outline of the course is intended to present and focus on some advanced major topics, such as:

- * Material properties of gases, liquids and solids; ionic and intermolecular interactions
- * Phase transitions and phase diagrams
- * Viscous, elastic and viscoelastic behaviour of materials
- * Polymeric materials: structure, properties, miscibility and mixing parameters, glass transition
- * Self-assembly of simple molecules: from nano- to supramolecular structures.
- * Soft matter materials from biological polymers or biologically inspired
- * Chemical and physical gels, their properties and swelling behavior.
- * Stimuli responsiveness of gels for different applications.

B029588 - SUPERSTRUCTURES AND MULTI-COMPONENTS ARCHITECTURES IN LIFE AND MATERIAL SCIENCES

Teachings of First year – Semester 2; Teaching Term: February – June; 6 ECTS. Teaching Hours: 56

Course content: The course deals with the study of complex molecular structures that can be naturally found in biological systems or assembled in hybrid architectures using surface science techniques. Specific characterization tools will be introduced including NMR, EPR, cryoEM, biophysical techniques for biological

samples as well as STM, LEED, XPS, UPS, SIMS, XAS and transport measurements for hybrid nanomaterials. Laboratory activity will be focused on the multi-technique characterization of these systems.

Course program: The course aims at providing to the student the necessary abilities to harness the functional properties resulting from the organization in complex architectures. The student will gain a multidisciplinary experience by applying the concepts of hierarchical organization and multifunctional design in the investigation of biomolecules and hybrid molecular-inorganic architectures.

Lectures: Non-covalent interactions in life sciences: Description of the nature of non-covalent and weak interactions in biomolecules, such as proteins and nucleic acids. Forces that determine their folding and their tridimensional structure. Molecular recognition and transient interactions. Factors determining partner selectivity. Kinetic and thermodynamics aspects. Metal-dependent protein-protein interactions and transfer. Assembly of large molecular machines and their interaction with substrates and their mode of action. Methods for their study (NMR, EPR, cryo EM, biophysical techniques).

Hybrid architectures in material sciences: Definition of the components of a complex architecture. Classes of solid substrates (insulating, semiconducting, metallic, magnetic, etc.). Growth modes, epitaxy and surface reconstruction. Deposition of functional molecules through physical and chemical methods: vapor deposition, electron-spray deposition, self-assembly from solution and other wet chemistry approaches. Surface mediated coordination chemistry and reactivity. Structural, chemical, and electronic characterization of surfaces and hybrid architectures through STM, LEED, XPS-UPS, SIMS, XAS, local and averaged conductivity measurements.

Laboratory practice:

- Life sciences (12 h): Characterization of some protein-protein interaction and of a metal transfer process as followed by heteronuclear NMR titrations. Determination of structural models of protein complexes, through experimental data and structural modeling.

- Material sciences (12 h): Preparation of surfaces via PVD and sputtering techniques. Self-assembly of a molecular monolayer. Morphological characterization through STM. XPS characterization. Analysis of morphological and spectroscopic data.

Optional courses

B029597 - ADVANCED POLYMERIC MATERIALS

Teachings of Second year – Semester 1; Teaching Term: September – December; 6 ECTS. Teaching Hours: 56

Course program: Aim of the course is to be a guide and a support for the student in modern polymer chemistry. First it will be offered an overview on the main synthetic aspects, the control over polymer structure and possible functionalization reactions. After that, the main aspects of renewable, biocompatible and sustainable polymers will be described. Finally, a large part will be dedicated to offer a wide panoramic on smart polymers and their current applications.

The student is expected to become familiar with the synthetic aspects of modern polymerization technique and their current applications.

Lectures: The course will include guided self-study, lectures given by the course teachers and by invited international experts, final oral exam.

GENERAL:

Possible structures (homo- and co-polymers, linear, branched, grafted, network, random, statistic, block, gradient)

Advanced Synthesis and Characterization (step and chain growth, ATRP, RAFT, ROMP, ROP, living, MIP)

Renewable, compostable, biocompatible, sustainable polymers (introduction, main type, applications)

Polymer Functionalization

SMART POLYMERS AND APPLICATIONS

Pharma-polymers and Polymeric Biomaterials; Stimuli-responsive polymers; Smart polymer hydrogels; Metal Polymers; Polymers of Intrinsic Porosity (Mixed Matrix Membrane Vapor/Gas adsorption); Conducting/Semiconducting/Conjugated Polymers

Laboratory practice

One or more experiences on a complete synthesis and characterization and application of smart polymers.

B029599 - CHEMICAL BIOTECHNOLOGY

Teachings of Second year – Semester 1; Teaching Term: September – December; 6 ECTS. Teaching Hours: 56

Course program: Analytical workflow in life sciences: from bed to bench. Sample preparation and treatment, data acquisition and analysis in pediatric and adult clinical chemistry. Analytical technologies and methodologies in the field of “clinical chemistry” research and diagnostic procedures: advanced mass spectrometric and chromatographic procedures and techniques, advanced high throughput techniques.

B029598 - CHEMISTRY AND THE OMIC SCIENCE

Teachings of Second year – Semester 1; Teaching Term: September – December; 6 ECTS. Teaching Hours: 56

Course program: Aim of the course is to train students on advanced chemical and biochemical methods in 'omic' sciences. In this course, in fact, students will learn the basic principles of genomics, transcriptomics, proteomics, metabolomics technologies. Statistical methods for data analysis and integration will also be part of the course, to help in the interpretation of the produced –omics data. The course will illustrate how these 'omic' data can be applied and adapted to answer major questions in biomedicine and in other fields of research.

Lectures: Introduction to Omic sciences. Principles and applications of the following technologies: Genomics Technologies- high-throughput sequencing technologies; Transcriptomics technologies - Affymetrix Technology, Illumina Technology; Proteomics Technologies - solid and liquid microarray technologies, mass spectrometry technologies; Metabolomics Technologies - mass spectrometry technologies and magnetic nuclear resonance technologies. Basic principles of the common analytical tools. Applications of Omic sciences to biotechnology, health and pharmaceuticals, nutritional sciences.

Laboratory practice: For genomics and transcriptomics technologies: preparation of nucleic acids for experiments; major phases of omics protocols; platforms used. Example of software and bioinformatics tools for the analysis and interpretation of genomics and transcriptomics data. Sample preparation, acquisition of the data using a 600 MHz NMR instrument, processing of the spectra using Amix and Topspin software, data analysis using the "R" statistical environment.

B029596 - MEDICINAL CHEMISTRY

Teachings of Second year – Semester 1; Teaching Term: September – December; 6 ECTS. Teaching Hours: 56

Course program: The aim of the course is to give to students the basic principles of drug-target interaction and on the importance of physicochemical properties on drug activity. An overview of the drug discovery process will be presented, and computational modeling hand-on exercises will be performed. The student is expected to become familiar with the chemical aspects of drug discovery.

Lectures: The fate of drug in the body. Physicochemical properties and drug design. Pharmacodynamics (drug-receptor and drug-enzyme interaction). The drug discovery process. Advanced methods for the production of biological drugs. Strategies for drug optimization.

Laboratory practice: Computational tool in drug discovery: structure-based and ligand-based methods. Case studies applied to modern drug development

B029600 - SOFT MATTER MATERIALS APPLIED TO DRUG DELIVERY SYSTEMS, FOOD SUPPLEMENTS AND COSMETIC SCIENCES

Teachings of Second year – Semester 1; Teaching Term: September – December; 6 ECTS. Teaching Hours: 56

Course program: The course will focus on the basic principles of the pre-formulation and application of soft matter materials to develop drug delivery systems and delivery systems to administrate food supplements and cosmetic products. It will underline on the modern approaches to formulate vesicles, nanoparticles, micelles, semi-solid formulations, microemulsions and nanoemulsions, and appropriate analytical techniques in order to fully characterize the formulations.

Lectures: Classification of soft matter materials for delivery systems. Definition of vesicles, nanoparticles, micelles, semi-solid formulations, microemulsions and nanoemulsions. Encapsulation efficiency, morphology, particle size, zeta potential, stability studies, release studies, permeation across biological membranes, rheology. Pharmaceutical application, formulations for food supplements and cosmetic science. Routes of administrations and interaction with biological systems. Active and passive targeting of drug delivery systems. Safety and efficacy.

Laboratory practice: Design and development of formulations based on soft matter materials applied to drug delivery systems, food supplements and cosmetic science. Characterization of formulations in terms of drug entrapment, chemical stability and release (HPLC), morphology (Cryo-EM, TEM), particle size, zeta-potential

and physical stability (DLS, ELS), release and permeation (HPLC, PAMPA, Franz diffusion cells). Rheological properties.

B029595 - SOLID STATE AND MATERIAL CHEMISTRY

Teachings of Second year – Semester 1; Teaching Term: September – December; 6 ECTS. Teaching Hours: 56

Course program: The course aims at providing the fundamental concepts of solid state with emphasis on structure-property (magnetic, electronic, optical, etc.) and structure-function (sensing, energy storage, etc.) relationships. The student will gain competences in crystallography and other X-ray based characterization techniques and will be introduced to the main technological applications of solid state materials.

Lectures: Classification of materials. Introduction to the solid state (band structure, symmetry elements, lattices, point groups, Laue classes, crystal systems, Bravais lattices, space groups). Elements of X-ray diffraction (both from single crystal and microcrystalline material), X-ray crystallography and other non-destructive X-ray techniques (X-ray fluorescence and X-ray microtomography). Dimensional effects in the solid state. Overview of materials for applications in electronics, optics, and energy.

Laboratory practice: Synthesis of metallic and metal-oxide nanoparticles, synthesis of a high temperature superconductor, single crystal and powder X-ray diffraction data collection and analysis, X-ray fluorescence and X-ray microtomography analyses, magnetic and optical characterization.

Other Activities

B029646 - FINAL EXAMINATION: EXPERIMENTAL WORK

Teachings of Second year – Semester 2; Teaching Term: February – June; 30 ECTS. Teaching Hours: 6 months

B029647 - FINAL EXAMINATION: WRITING AND DISCUSSION

Teachings of Second year – Semester 2; Teaching Term: February – June; 6 ECTS. Teaching Hours: 60

B029648 – TRAINEESHIP

Teachings of Second year – Semester 2; Teaching Term: February – June; 6 ECTS. Teaching Hours: 150

| | ECTS |
|--------------|-------------|
| TOTAL | 120 |

| | | | | | | | | | | | |
|------------|----|----|------|----|-------|------|----|----|----|----|---------|
| ECTS grade | F | E | E | E | D | D | C | C | B | B | A |
| France | 9 | 10 | 10.5 | 11 | 11.25 | 11.5 | 12 | 13 | 14 | 15 | 16-20 |
| Italia | 17 | 22 | 23 | 24 | 25 | 26 | 27 | 28 | 29 | 30 | 30+lode |

| ECTS GRADE | | Italian Grade/Voto/Giudizio |
|---------------|--------------|-----------------------------|
| A-A cum laude | Excellent | 30 (maximum) 30 e lode |
| B | Verygood | 27-29 |
| C | Good | 25-26 |
| D | Satisfactory | 22-24 |
| E | Sufficient | 21-18 |
| F | Fail | 17-0 |