

Laurea magistrale in Chimica
Anno accademico 2012-13

Anno di Corso	Insegnamento	
I	Chimica Teorica e Computazionale	X
I	Spettroscopia	X
I	Chimica Metallorganica e Catalisi	X
I	Chimica di Coordinazione e Bioinorganica	X
I	Chimica Supramolecolare con APplicazioni Spettroscopiche	X
I	Validazione del Dato Analitico e Chemiometria	X
I	Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali	X
I	Metodi Fisici in Chimica Organica	
II	Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali con Laboratorio	X
II	Chimica Fisica dei Sistemi Microeterogenei	X
II	Struttura e Stereochimica delle Sostanze Naturali	X

FACOLTÀ	Scienze MM.FF.NN.
ANNO ACCADEMICO	2012/2013
CORSO DI LAUREA MAGISTRALE	Corso di Laurea Magistrale in Chimica
INSEGNAMENTO	Chimica Teorica e Computazionale
TIPO DI ATTIVITÀ	Caratterizzante
AMBITO DISCIPLINARE	Discipline inorganiche e chimico-fisiche
CODICE INSEGNAMENTO	16581
ARTICOLAZIONE IN MODULI	NO
NUMERO MODULI	1
SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI	CHIM/02
DOCENTE RESPONSABILE	Francesco Ferrante Ricercatore Università di Palermo
CFU	4 + 2
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	94
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE	32 + 24
PROPEDEUTICITÀ	Nessuna
ANNO DI CORSO	Primo
SEDE DI SVOLGIMENTO DELLE LEZIONI	Aula E
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali, Esercitazioni al computer
MODALITÀ DI FREQUENZA	Obbligatoria
METODI DI VALUTAZIONE	Prova Orale
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
PERIODO DELLE LEZIONI	Primo semestre
CALENDARIO DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE	Dal lunedì al venerdì 08.30 – 10.00
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	Lu, Me, Ve ore 12-13

RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Conoscenza e capacità di comprensione della meccanica quantistica e della chimica quantistica

Capacità di applicare conoscenza e comprensione della meccanica quantistica in ambito chimico, in particolare nel calcolo della struttura elettronica molecolare e delle proprietà che ne derivano

Autonomia di giudizio nell'applicazione dei modelli di risoluzione del problema polielettronico a problematiche di natura chimica e chimico-fisica

Abilità comunicative riguardanti i concetti e le problematiche generali della chimica quantistica e la loro applicazione a problemi di natura chimica specifica

Capacità d'apprendimento di testi a livello universitario riguardanti metodi e applicazioni della chimica quantistica; di articoli scientifici riportanti ricerche originali

OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO

Il corso di Chimica Teorica e Computazionale ha lo scopo di impartire allo studente i concetti fondamentali della meccanica quantistica e le tecniche per la loro applicazione alle problematiche chimiche legate alla struttura elettronica degli atomi e delle molecole. La parte centrale del corso

riguarda l'esposizione dei più comuni metodi di risoluzione approssimata del problema polielettronico, a partire dal modello di Hartree-Fock per arrivare alle più sofisticate metodologie moderne, come la teoria *coupled cluster*, passando per le tecniche basate sulla teoria del funzionale della densità. Il corso prevede due crediti di esercitazioni al computer, dove vengono applicate le metodologie esposte nelle lezioni frontali a problemi chimici e chimico-fisici, come il calcolo di proprietà molecolari e spettroscopiche, la simulazione di reazioni chimiche, la trattazione di sistemi complessi. Lo studente avrà anche modo, con tali esercitazioni, di imparare l'utilizzo di svariati *software* per il calcolo delle struttura elettronica di una molecola.

MODULO	CHIMICA TEORICA E COMPUTAZIONALE
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
4	Complementi di matematica
	Spazi vettoriali N-dimensionali complessi
	Equazioni agli autovalori
5	Fondamenti della Meccanica Quantistica
	Formulazione assiomatica della Meccanica Quantistica
	Richiami sui sistemi quantistici risolvibili esattamente
	Gli atomi idrogenoidi
	Gli orbitali atomici e le loro proprietà
3	Introduzione al problema polielettronico
	Il teorema variazionale
	Il problema dello spin
	I determinanti di Slater
6	Il metodo di Hartree-Fock
	Derivazione e significato delle equazioni di Hartree-Fock
	Il concetto di orbitale molecolare
	La procedura del campo autoconsistente
	I set di base
	Le proprietà molecolari
5	I metodi post-Hartree-Fock
	L'interazione di configurazione e la funzione d'onda Full-CI
	Il metodo perturbativo
	Il metodo Coupled Cluster
4	La teoria del funzionale della densità
	Concetti alla base della teoria
	Le equazioni di Kohn-Sham
	I funzionali di scambio-correlazione
5	La teoria dei gruppi di simmetria
	La simmetria molecolare e i gruppi di simmetria
	Proprietà del prodotto diretto
	Applicazioni ai sistemi molecolari
	ESERCITAZIONI
1	L'utilizzo del computer e dei programmi di calcolo della struttura elettronica
4	L'ottimizzazione della geometria molecolare e il calcolo delle frequenze di vibrazione armonica; i metodi per descrivere l'effetto del solvente; applicazioni.
3	I metodi per la caratterizzazione degli stati di transizione e dei meccanismi di reazione; applicazioni.
3	Simulazione di uno spettro NMR: calcolo dei tensori di shielding e delle costanti di accoppiamento tramite la teoria del funzionale della densità; applicazioni.
3	Calcolo di costanti spettroscopiche tramite metodi accuratissimi: le transizioni rotazionali; applicazioni.
3	Calcolo di costanti spettroscopiche tramite metodi <i>multireference</i> : le transizioni elettroniche; applicazioni.
4	L'utilizzo di metodi ibridi per lo studio di una reazione chimica catalizzata da un <i>cluster</i> metallico supportato.
3	Versione relativistica della meccanica quantistica. Metodi e software per la risoluzione approssimata dell'equazione di Dirac. Valutazione dell'accoppiamento spin-orbita nei metalli pesanti.

TESTI CONSIGLIATI	Dispense fornite dal docente Testi di riferimento: <ul style="list-style-type: none">- Ira N. Levine "Quantum Chemistry" Ed. Prentice Hall- Christopher J. Cramer "Computational Chemistry - Theories and Models" Ed. Wiley.- Attila Szabo, Neil S. Ostlund "Modern Quantum Chemistry - Introduction to Advanced Electronic Structure Theory" Ed. MacMillan Publishing Co.

FACOLTÀ	Scienze MM FF NN
ANNO ACCADEMICO	2012/2013
CORSO DI LAUREA MAGISTRALE	Chimica
INSEGNAMENTO	Spettroscopia
TIPO DI ATTIVITÀ	Caratterizzante
AMBITO DISCIPLINARE	Discipline chimiche inorganiche e chimico-fisiche
CODICE INSEGNAMENTO	06629
ARTICOLAZIONE IN MODULI	NO
NUMERO MODULI	1
SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI	CHIM/02
DOCENTE RESPONSABILE	Vincenzo Turco Liveri Professore Ordinario Università di Palermo
CFU	4+2 (32 ore + 24 ore)
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	94
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE	56
PROPEDEUTICITÀ	Nessuna
ANNO DI CORSO	Primo
SEDE	Aula E
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali + esercitazioni numeriche
MODALITÀ DI FREQUENZA	Obbligatoria
METODI DI VALUTAZIONE	Prova orale
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
PERIODO DELLE LEZIONI	Primo semestre
CALENDARIO DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE	Dal lunedì al venerdì 10.00 – 11.00
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	Da concordare con il docente vincenzo.turcoliveri@unipa.it

<p>RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI</p> <p>Conoscenza e capacità di comprensione Apprendimento dei principi che regolano l'interazione luce materia. Comprensione della relazione tra proprietà molecolari e proprietà spettrali della materia. Interpretazione microscopica di frequenza, intensità e larghezza delle bande di assorbimento/emissione. Aspetti teorici e sperimentali di alcune spettroscopie (rotazionale, vibrazionale, elettronica, etc) per la caratterizzazione di sistemi chimico fisici.</p> <p>Capacità di applicare conoscenza e comprensione Sviluppo della capacità di applicazione dei principi di spettroscopia nell'ottenimento di informazioni molecolari da spettri.</p> <p>Autonomia di giudizio Sviluppo della capacità di analizzare criticamente la letteratura scientifica pertinente.</p> <p>Abilità comunicative Capacità di comunicare mediante il linguaggio scientifico le conoscenze acquisite</p> <p>Capacità d'apprendimento Sviluppo della capacità di organizzare in maniera autonoma l'acquisizione di ulteriori conoscenze nel campo delle tecniche spettroscopiche.</p>
--

OBIETTIVI FORMATIVI DEL CORSO

Obiettivo del corso è fornire una conoscenza approfondita i) dei principi e delle leggi che regolano le proprietà spettroscopiche delle molecole, ii) delle metodologie necessarie allo studio spettroscopico di sistemi chimico fisici, contribuendo così a fornire una solida base in Chimica che consenta al laureato di primo livello di svolgere attività lavorative in vari laboratori chimici (controllo e analisi, ambito industriale, ambiente ed energia, Beni Culturali, Scienza dei materiali, etc) perseguendo finalità teoriche o applicative e utilizzando nuove metodologie e attrezzature complesse.

CORSO	SPETTROSCOPIA
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
1	Introduzione al corso
3	La radiazione elettromagnetica. Teoria ondulatoria e corpuscolare
3	L'interazione radiazione/molecole, L'interferometro e la spettroscopia FT
5	Assorbimento ed emissione di radiazione in un sistema all'equilibrio e fuori dall'equilibrio. I coefficienti di Einstein
3	L'intensità, la larghezza e la posizione delle bande
3	spettroscopia rotazionale, spettri rotazionali
3	spettroscopia vibrazionale, spettri vibrazionali
3	La spettroscopia Raman rotazionale e vibrazionale
4	La spettroscopia atomica e molecolare elettronica, spettri atomici e molecolari
4	La spettroscopia in fluorescenza
ORE ESERC.	ESERCITAZIONI NUMERICHE
6	Analisi di spettri rotazionali
6	Analisi di spettri vibrazionali
6	Analisi di spettri atomici e molecolari
6	Analisi di spettri di fluorescenza
TESTI CONSIGLIATI	- JM Hollas, Modern Spectroscopy, J Wiley & Sons 1992 -P. W. Atkins, Chimica Fisica, Ed. Zanichelli -appunti delle lezioni

FACOLTÀ	Scienze MM.FF.NN.
ANNO ACCADEMICO	2012-2013
CORSO DI LAUREA MAGISTRALE	Chimica
INSEGNAMENTO	Chimica Metallorganica e Catalisi
TIPO DI ATTIVITÀ	Caratterizzante
AMBITO DISCIPLINARE	Discipline Inorganiche e Chimico Fisiche
CODICE INSEGNAMENTO	16491
ARTICOLAZIONE IN MODULI	NO
NUMERO MODULI	1
SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI	CHIM03
DOCENTE RESPONSABILE	Dario Duca Professore ordinario Università di Palermo
CFU	6 CFU – II semestre
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	102
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE	48
PROPEDEUTICITÀ	Nessuna
ANNO DI CORSO	I
SEDE DI SVOLGIMENTO DELLE LEZIONI	Aula E – Dipartimento di Chimica, viale delle Scienze, Ed. 17
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali
MODALITÀ DI FREQUENZA	Obbligatoria
METODI DI VALUTAZIONE	Prova orale
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
PERIODO DELLE LEZIONI	Secondo semestre
CALENDARIO DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE	lunedì , mercoledì e venerdì 10.00 – 12.00
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	Tutti i giorni, per appuntamento E-mail: dduca@ccc.unipa.it

RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Si attendono:

conoscenza e capacità di comprensione nello studio della catalisi e delle sue basi;

capacità di applicazione di conoscenze relative ai principi della catalisi secondo una prospettiva unitaria che raggruppi i processi omogenei, eterogenei ed enzimatici;

autonomia di giudizio nell'individuazione e progettazione di vie sintetiche eco-sostenibili coinvolgenti i processi catalitici e i modelli che li rappresentano;

abilità comunicative riguardanti la catalisi nei diversi ambiti di applicazione ed i suoi principi e modelli;

capacità di apprendimento da testi di livello universitario e specialistico che trattino lo studio della catalisi, dei suoi principi e dei suoi modelli.

OBIETTIVI FORMATIVI

Il corso è svolto in un semestre mediante lezioni frontali e (in una prima fase) approfondisce l'analisi della chimica metallorganica che costituisce la base utile allo sviluppo dei primi schemi meccanicistici da utilizzare nello studio della catalisi. Nel corso dell'analisi di quest'ultima (svolta in seconda battuta) sono invece forniti, in maniera integrata, i fondamenti riguardanti l'origine della catalisi, i suoi principi – nei diversi ambiti d'applicazione – e gli strumenti (sperimentali e teorici) utili: *i*) alla progettazione di vie sintetiche eco-sostenibili di processi catalitici d'interesse industriale e *ii*) all'individuazione dei modelli che li rappresentano.

CHIMICA METTALORGANICA E CATALISI	
ORE	LEZIONI
2	Leganti in Chimica Organometallica
2	Legami fra Atomi Metallici e Sistemi Organici
3	Analisi spettrale e caratterizzazione di specie organometalliche
3	Reazioni con acquisto o perdita di leganti
2	Reazioni che modificano i leganti
3	Legami Metallo-Metallo
3	Composti a <i>Cluster</i>
4	Origini e Basi della Catalisi
4	Catalisi Metallorganica
4	Catalisi Omogenea
4	Catalisi Eterogenea
4	Bio-Catalisi
10	Aspetti Modellistici della Catalisi
TESTI CONSIGLIATI APPROFONDIMENTO	CHIMICA INORGANICA ; Gary L. Miessler, Donald A. Tarr – Piccin 2011. CATALYSIS Concepts and Green Applications; Gadi Rothenberg – WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. 2008. METAL-CATALYSED REACTIONS OF HYDROCARBONS Fundamental and Applied Catalysis; Geoffrey C. Bond – Springer Science + Business Media, Inc. 2005. MOLECULAR HETEROGENEOUS CATALYSIS A Conceptual and Computational Approach; Rutger A. van Santen, Matthew Neurock – WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. 2006. MECHANICAL CATALYSIS Methods of Enzymatic, Homogeneous, and Heterogeneous Catalysis; Gerhard F. Swiegers – John Wiley & Sons, Inc. 2008.

FACOLTÀ	Scienze MM.FF.NN.
ANNO ACCADEMICO	2012/2013
CORSO DI LAUREA MAGISTRALE	Chimica
INSEGNAMENTO	Chimica di Coordinazione e Bioinorganica
TIPO DI ATTIVITÀ	Caratterizzante
AMBITO DISCIPLINARE	Discipline Chimiche Inorganiche e Chimico-Fisiche
CODICE INSEGNAMENTO	16492
ARTICOLAZIONE IN MODULI	NO
NUMERO MODULI	-
SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI	CHIM/03
DOCENTE RESPONSABILE	Claudia Pellerito Ricercatore confermato Università di Palermo
CFU	6
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	102
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE	48
PROPEDEUTICITÀ	Nessuna
ANNO DI CORSO	1
SEDE DI SVOLGIMENTO DELLE LEZIONI	Aula E
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali
MODALITÀ DI FREQUENZA	Obbligatoria
METODI DI VALUTAZIONE	Prova Orale
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
PERIODO DELLE LEZIONI	Primo semestre
CALENDARIO DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE	Dal lunedì al venerdì 11.00 – 12.00
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	Da concordare con il docente claudia.pellerito@unipa.it

RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Conoscenza e capacità di comprensione

Conoscenza della struttura e delle proprietà chimico-fisiche di complessi metallici.

Acquisizione degli strumenti avanzati per lo studio dei composti di coordinazione e della loro interazione con i sistemi biologici. *Capacità di utilizzare il linguaggio specifico proprio di questa disciplina specialistica*

Capacità di applicare conoscenza e comprensione

Capacità di riconoscere composti di coordinazione presenti in sistemi biologici e di prevederne la reattività e le caratteristiche strutturali che influenzano i sistemi in cui sono presenti.

Capacità di individuare gli ioni metallici con ruolo fisiologico, e quelli tossici.

Autonomia di giudizio

Interpretare in maniera critica dati sperimentali riguardanti la sintesi, le proprietà e l'utilizzo di composti di coordinazione.

Essere in grado di valutare le implicazioni biologiche di alterazioni o variazioni strutturali dei complessi esistenti naturalmente nei sistemi biologici, o di valutare l'effetto biologico di complessi di sintesi in base alla loro composizione chimica

Abilità comunicative

Argomentare coerentemente aspetti riguardanti la chimica dei composti di coordinazione sulla base delle conoscenze acquisite.

Capacità di esporre le valutazioni e le riflessioni sulle tematiche affrontate anche ad un pubblico non esperto. Essere in grado di sostenere l'importanza ed evidenziare le ricadute ambientali e biologiche della presenza degli ioni metallici e dei loro complessi.

Capacità d'apprendimento

Capacità di aggiornamento con la consultazione delle pubblicazioni scientifiche proprie del settore della chimica dei composti di coordinazione, della tossicologia e della chimica bioinorganica. Capacità di seguire, utilizzando le conoscenze acquisite nel corso, sia master di secondo livello, sia corsi d'approfondimento sia seminari specialistici nel settore della chimica bioinorganica.

OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO

L'insegnamento si propone di fornire agli studenti conoscenze approfondite sui composti di coordinazione presenti nei sistemi biologici e di prevederne la reattività e le caratteristiche strutturali che influenzano i sistemi in cui sono presenti.

MODULO	CHIMICA DI COORDINAZIONE E BIOINORGANICA
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
2	Struttura e isomeria
8	Richiami di concetti di chimica generale. Teorie alla base della formazione del legame chimico
6	Classificazione dei leganti
8	Composti di coordinazione: sintesi e caratterizzazione
6	Sistema ADME (Assorbimento – Distribuzione – Metabolismo – Escrezione). Ioni metallici nei sistemi biologici: macroelementi, microelementi e oligoelementi (sodio, potassio, calcio, magnesio, ferro, molibdeno, cobalto, zinco, rame, cromo, selenio). Ruolo fisiologico, omeostasi, trasporto e immagazzinamento.
4	I metalli pesanti: tossicità e interazione con biomolecole (stagno, mercurio, arsenico, cadmio, piombo).
2	Ioni metallici e composti metallici in medicina (platino, gadolinio, tecnezio, cobalto, oro).
6	Proteine contenenti metalli: ferro-proteine (eme, non-eme), rame-proteine, zinco-proteine.
6	Enzimi contenenti rame, ferro, zinco ed enzimi contenenti altri metalli (ex. Nichel, vanadio, molibdeno).
TESTI CONSIGLIATI	<p>Inorganic Chemistry; G.L. Miessler, D.A. Tarr; Prentice Hall, 4th edition, 2010 Group Theory and Chemistry; D.M. Bishop; Dover, 1993</p> <p>- SJ Lippard-JM Berg Principles of Bioinorganic Chemistry , Ed. University Science Books -Wolfgang Kaim, Brigitte Schwederski "Bioinorganic Chemistry: Inorganic Elements in the Chemistry of Life." John Wiley and Sons - G.L.Miessler, D.A.Tarr - Inorganic Chemistry, Ed. Prentice Hall -J.A.Cowan - Inorganic Biochemistry. An introduction Ed.Wiley -J.J.R. Fraústo da Silva and R.J.P. Williams, <i>The biological chemistry of the elements: The inorganic chemistry of life</i>, 2nd Edition, Oxford University Press.</p>

FACOLTÀ	Scienze MM.FF.NN.
ANNO ACCADEMICO	2012/2013
CORSO DI LAUREA MAGISTRALE	Chimica
INSEGNAMENTO	Chimica Supramolecolare con Applicazioni Spettroscopiche
TIPO DI ATTIVITÀ	Caratterizzante
AMBITO DISCIPLINARE	Discipline chimiche organiche
CODICE INSEGNAMENTO	16493
ARTICOLAZIONE IN MODULI	SI
NUMERO MODULI	2
SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI	CHIM/06
DOCENTE RESPONSABILE (MODULO 1)	Renato Noto Professore Ordinario Università di Palermo
DOCENTE COINVOLTO (MODULO 2)	Paolo Lo Meo Professore Associato Università di Palermo
CFU	6 (mod 1) + 6 (mod 2)
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	197
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE	48 (mod 1) 55 (mod 2)
PROPEDEUTICITÀ	Nessuna
ANNO DI CORSO	I
SEDE DI SVOLGIMENTO DELLE LEZIONI	Aula E (Ed. 17 – Piano I)
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali, Esercitazioni in laboratorio
MODALITÀ DI FREQUENZA	Obbligatoria
METODI DI VALUTAZIONE	Prova Orale
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
PERIODO DELLE LEZIONI	Secondo semestre
CALENDARIO DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE	Dal lunedì al venerdì 08.00 -10-00 Laboratorio Mercoledì 14.00 – 18.00
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	Prof. R. Noto - Da programmare renato.noto@unipa.it Prof. P. Lo Meo - Da lunedì a venerdì 11.00-12.00 paolo.lomeo@unipa.it

RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Conoscenza e capacità di comprensione

Acquisizione degli strumenti per la redazione di uno studio relativo alle interazioni intermolecolari.
Capacità di utilizzare il linguaggio specifico proprio di questa disciplina.

Capacità di applicare conoscenza e comprensione

Capacità di riconoscere, e organizzare, in autonomia, i principi generali della disciplina nella discussione e interpretazione di dati riguardanti strutture supramolecolari.

Capacità di applicare metodologie spettroscopiche e strumentali nell'approccio a problematiche inerenti i diversi settori della chimica organica.

Autonomia di giudizio

Essere in grado di valutare quando sono possibili interazioni deboli fra le molecole e ricondurre, a seconda dei casi, risultati sperimentali ai principi di base della disciplina .

Abilità comunicative
Capacità di esporre, anche a un pubblico non esperto, i risultati degli studi di differenti sistemi organizzati e ricondurli ai principi base della disciplina.

Capacità d'apprendimento
Capacità di aggiornamento e ampliamento delle conoscenze sulla disciplina attraverso la consultazione delle pubblicazioni scientifiche proprie del settore.

OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO
Riportati nel Regolamento Didattico del Corso di Studio

MODULO 1	CHIMICA SUPRAMOLECOLARE
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
1	Breve Storia delle tappe della Chimica Supramolecolare
3	Clatrati e Cavitati
6	Forze intramolecolari, Selettività, Effetto chelante, Effetto macrociclo, preorganizzazione e complementarità.
10	Eteri corona: generalità sulla sintesi, nomenclatura, struttura, proprietà complessanti. Calixareni: generalità sulla sintesi, nomenclatura, equilibri conformazionali, capacità complessanti. Lariat eteri, Podandi, Sferandi.
4	Recettori per anioni. Confronto fra il riconoscimento dei cationi e degli anioni. I katapinandi, recettori tetraedrici, recettori lineari.
5	Recettori per molecole neutre. Ciclodestrine: funzionalizzazione, proprietà complessanti.
5	Zeoliti, clatrati e clatrati idrati.
10	Liquidi ionici: nomenclatura, struttura, proprietà, effetti catalitici. Cristalli liquidi. Gel, caratteristiche, struttura e proprietà.
4	Nanochimica, macchine molecolari, nanotubi, fullereni.
TESTI CONSIGLIATI	<ul style="list-style-type: none"> - J. W. Steed, J. L. Atwood "Supramolecular Chemistry" Wiley. - Fotocopie di articoli e/o review fornite dal docente.

OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO
Il corso di **Metodi Spettroscopici in Chimica Organica** si prefigge di sviluppare e completare le conoscenze sull'uso delle metodologie fisiche di indagine strutturale, di separazione e di analisi in chimica organica già acquisite dagli studenti nei precedenti insegnamenti.

MODULO	METODI SPETTROSCOPICI IN CHIMICA ORGANICA E SUPRAMOLECOLARE
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
2	Richiami generali di spettroscopia organica: Concetti fondamentali di spettroscopia UV, IR e NMR.
5	Metodologie avanzate di spettrometria di massa: richiami alla teoria

	classica degli spettri di massa; cenni alla <i>Quasi-Equilibrium Theory</i> e sue conseguenze; metodi di ionizzazione in MS: IE, CI, ESI, tecniche di desorbimento, MALDI
3	Analizzatori e trappole ioniche: analizzatori a settore magnetico ed elettrostatico, analizzatori quadrupolari, QUISTOR, TOF, analizzatori in FT; problemi inerenti la focalizzazione del fascio ionico e la risoluzione spettrale; tecniche MS-MS.
3	Applicazione della spettroscopia di massa all'indagine di molecole di interesse biologico (proteine, acidi nucleici, grassi, acidi biliari).
2	Aspetti teorici della Spettroscopia di risonanza magnetica richiami alla teoria dello <i>spin</i> nucleare e dell'elettrone e dell'interazione tra particelle ed onde elettromagnetiche. Eccitazione di nuclei con $\text{spin } \frac{1}{2}$, Rilassamento, Chemical shift, Molteplicità, Costanti di accoppiamento, Legge di Karplus. Equivalenza di spostamento chimico, Equivalenza magnetica.
4	Spettroscopia ESR: accoppiamento elettrone-nucleo e struttura iperfine degli spettri ESR; teoria delle costanti di accoppiamento iperfine; uso della spettroscopia ESR nell'indagine strutturale delle specie radicaliche; <i>spin traps</i> e loro uso.
4	Teoria generale dell'NMR a impulsi: definizione di vettore magnetizzazione, impulso e sue caratteristiche, FID e sua manipolazione, tempi di rilassamento e loro determinazione.
4	NMR Bidimensionale, tecniche COSY, HMQC, HMBC
2	Correlazioni ^{13}C - ^{13}C : INADEQUATE
2	TOCSY mono- e bi-dimensionale, HMQC-TOCSY, ROESY
2	NMR dinamico, NMR allo stato solido.
3	Metodologie avanzate di separazione e cromatografiche: teoria generale della cromatografia; equazione di van Deemter e sue conseguenze; HETP e sua valutazione; concetti di efficienza, selettività e risoluzione e loro legame.
2	HPLC: teoria generale dell'HPLC, strumentazione, colonne e rivelatori; GC: teoria generale della gas-cromatografia, strumentazione, colonne e rivelatori; Cromatografia su strato sottile e cromatografia radiale centrifuga; cenni alla cromatografia in fase supercritica.
2	Tecniche elettrocromatografiche ed elettroforetiche: teoria del flusso elettroforetico, elettroforesi capillare e suo uso, colonne monolitiche in CE; elettrocromatografia in pseudo-fase macellare .
	ESERCITAZIONI
15	Interpretazione combinata di spettri IR, MS e NMR mono- e bidimensionali
TESTI CONSIGLIATI	<ul style="list-style-type: none"> - Silverstein et al., Identificazione spettroscopica di composti organici, CEA - Pedulli, Metodi fisici in chimica organica, Piccin. - Skoog-Leary, Chimica Analitica Strumentale, Edises. - dispense fornite dal docente.

FACOLTÀ	Scienze MM. FF. NN.
ANNO ACCADEMICO	2012/2013
CORSO DI LAUREA MAGISTRALE	Chimica
INSEGNAMENTO	Validazione del Dato Analitico e Chemiometria
TIPO DI ATTIVITÀ	Caratterizzante
AMBITO DISCIPLINARE	Discipline chimiche analitiche ambientali
CODICE INSEGNAMENTO	16181
ARTICOLAZIONE IN MODULI	NO
NUMERO MODULI	1
SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI	CHIM/ 01
DOCENTE RESPONSABILE (MODULO 1)	Daniela Piazzese Professore Associato Università di Palermo
CFU	6
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	102
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE	48
PROPEDEUTICITÀ	Nessuna
ANNO DI CORSO	Primo
SEDE DI SVOLGIMENTO DELLE LEZIONI	Aula E Dipartimenti Chimici, Edificio 17, Viale delle Scienze parco d'Orleans II
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali
MODALITÀ DI FREQUENZA	Obbligatoria
METODI DI VALUTAZIONE	Esame orale comprendente quesiti di carattere teorico. L'esame prevede una prova selettiva scritta.
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
PERIODO DELLE LEZIONI	Primo semestre
CALENDARIO DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE	Da lunedì a venerdì 12.00 – 13.00
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	Martedì, Giovedì ore 10,30 - 12,00

RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Conoscenza e capacità di comprensione

Conoscenza delle leggi e dei protocolli procedurali che regolano il trattamento del dato analitico e le procedure di validazione dei risultati

Capacità di applicare conoscenza e comprensione

Grazie alle conoscenze e alla competenze acquisite nel corso, lo studente sarà in grado di riconoscere le fonti di variabilità in un gruppo di dati e di progettare attività di validazione delle procedure analitiche.

Autonomia di giudizio

Il grado di autonomia di giudizio acquisita dallo studente sarà valutato in sede di esame, attraverso la discussione di problematiche e dati reali.

Abilità comunicative

Capacità di riferire con proprietà di linguaggio le procedure sperimentali e di elaborazione dei dati.

Capacità d'apprendimento

Capacità di trasferire nella pratica sperimentale le nozioni teoriche già acquisite.

OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO

Lo studente deve acquisire la conoscenza dei principi base e delle tecniche per l'individuazione delle principali sorgenti di variabilità nei dati analitici e le capacità di impostare e realizzare una procedura di validazione del dato analitico.

MODULO 1	VALIDAZIONE DEL DATO ANALITICO
ORE FRONTALI	
2	Significato delle procedure di valutazione del dato analitico
2	Selettività
2	Limite di rivelabilità e di quantificazione
2	Range dinamico e lineare
2	Esattezza e Precisione
6	Incertezza di misurazione
1	Robustezza
1	Recupero
6	Carte di controllo
2	Significato e finalità dell'analisi multivariata.
2	Analisi iniziale. Verifica del tipo di variabili.
2	Analisi delle Componenti Principali (PCA)
4	Scores e loadings. Grafici
2	Numero delle componenti significative
4	Analisi dei clusters

2	Riconoscimento dei modello controllato
2	Modellamento a classi disgiunte
2	Metodi di regressione
2	Uso del software
TESTI CONSIGLIATI	E. De Simone, B. Brunetti. L'elaborazione dei dati nel laboratorio di analisi chimiche. Clueb ed. 2010 Richard G. Brerenton, <i>Chemometrics</i> , Wiley (2003) James N. Miller & Jane C. Miller, <i>Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry</i> , 6° ed., Pearson Prentice Hall (2010)

FACOLTÀ	Scienze MM.FF.NN.
ANNO ACCADEMICO	2012/2013
CORSO DI LAUREA MAGISTRALE	Chimica
INSEGNAMENTO	Chimica dell' Ambiente e dei Beni Culturali
TIPO DI ATTIVITÀ	Caratterizzante
AMBITO DISCIPLINARE	Discipline chimiche analitiche e ambientali
CODICE INSEGNAMENTO	08443
ARTICOLAZIONE IN MODULI	No
NUMERO MODULI	-
SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI	CHIM/12
DOCENTE RESPONSABILE	Santino Orecchio Professore Associato Dipartimento di Chimica "S. Cannizzaro" Università degli Studi di Palermo
CFU	6
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	81
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE	69
PROPEDEUTICITÀ	Nessuna
ANNO DI CORSO	Primo
SEDE	Aula E
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali + Esercitazioni di laboratorio
MODALITÀ DI FREQUENZA	Obbligatoria
METODI DI VALUTAZIONE	Test risposte multiple ed esercizi + Presentazione e discussione di un elaborato (tesina)
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
PERIODO DELLE LEZIONI	II Periodo
CALENDARIO DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE	Publicato sul sito del Corso di Laurea
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	Contattare preliminarmente il docente Prof. Santino Orecchio E-mail: santino.orecchio@unipa.it Telefono studio: 091 6451777 Cellulare: 3392029903

RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Conoscenza e capacità di comprensione

L'obiettivo del corso è di fornire i concetti di base per la definizione della composizione e delle caratteristiche chimiche degli ecosistemi naturali (acqua, aria, suolo, sedimenti). Inoltre il corso fornisce i concetti di base per definire la composizione e le caratteristiche chimiche dei materiali inerenti i beni culturali; e definisce i principi fisici che regolano i fenomeni di interazione radiazione-materia al fine di potenziare le capacità di comprendere il linguaggio scientifico relativo a tecniche chimico fisiche non distruttive e microinvasive.

I concetti ambientali saranno elaborati nell'ottica dei cicli biogeochimici, al fine di individuare e definire i processi di inquinamento ambientale. Inoltre gli studenti devono acquisire gli strumenti per la progettazione e la redazione di una ricerca nel campo ambientale o in quello dei beni culturali, a partire dalle operazioni di campionamento fino all'elaborazione ed interpretazione dei risultati ed, eventualmente proporre soluzioni ed idee per la bonifica ambientale o per la

caratterizzazione dei materiali adoperati per le opere d'arte e per il loro restauro. I concetti saranno elaborati nell'ottica dell'interazione dei materiali e delle opere con le sostanze presenti nell'ambiente, al fine di individuare e definire i processi di degrado.

Capacità di applicare conoscenza e comprensione

Capacità di definire:

le caratteristiche chimiche principali di un ecosistema naturale in termini di composizione e reattività;

le caratteristiche chimiche principali dei materiali utilizzati per le opere d'arte in termini di composizione e reattività.

Capacità di applicare le conoscenze, la capacità di comprensione e le abilità connesse all'utilizzo di tecniche chimico fisiche non distruttive e microinvasive ai fini della caratterizzazione di materiali di interesse ambientale e nei beni culturali, inseriti in contesti più ampi anche interdisciplinari.

Autonomia di giudizio

Essere in grado di individuare:

le interazioni tra i differenti comparti ambientali, facendo uso dei cicli biogeochimici;

i componenti antropogenici, con particolare riferimento al concetto di inquinamento;

interazioni tra i materiali e le differenti sostanze naturali ed antropiche presenti nell'ambiente;

i danni ai materiali, con particolare riferimento a quelli di origine antropica.

Valutare autonomamente le difficoltà applicative e i vantaggi derivanti dall'uso delle tecniche di indagine studiate. Dimostrare di avere la capacità di integrare le conoscenze e gestire la complessità, e formulare giudizi sulla base di informazioni limitate e incomplete.

Abilità comunicative

Essere in grado di esporre i concetti di base della chimica ambientale, integrandoli con il concetto di ciclo naturale (o biogeochimico) e di inquinamento dei vari comparti ambientali e quelli della chimica del restauro, integrandoli con il concetto di interazione con l'ambiente

Capacità di saper comunicare in modo chiaro e privo di ambiguità, anche a interlocutori non esperti, le proprie conclusioni e conoscenze.

Capacità d'apprendimento

Essere in grado di approfondire gli argomenti tramite articoli scientifici specifici della materia e di seguire seminari ed approfondimenti nell'ambito della chimica dell'ambiente.

OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO Chimica dell'ambiente

Il corso si propone di fornire i concetti per la definizione della composizione e delle caratteristiche chimiche degli ecosistemi naturali (acqua, aria, suolo) e dei materiali impiegati nell'esecuzione di opere d'arte. I concetti saranno rielaborati nell'ottica dei cicli biogeochimici, al fine di definire i processi di inquinamento ambientale e, nel caso dei beni culturali, ad individuare le cause ed i processi di degrado.

MODULO 1	Chimica dell'ambiente e dei Beni Culturali
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
2	Fasi salienti di una ricerca ambientale
2	Campionamento in ambienti naturali: Campionamento acque; Campionamento inquinanti atmosferici Campionamento suoli e sedimenti.
2	Chimica dell'atmosfera:

	<ol style="list-style-type: none"> 1. Le regioni dell'atmosfera; 2. Metodi di espressione delle concentrazioni dei gas nell'ambiente; 3. Composizione dell'atmosfera; 4. Strato di ozono; 5. Smog fotochimico; 6. Effetto serra.
1	<p>Inquinamento atmosferico:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Ossidi di zolfo; 2. Ossidi di azoto; 3. Particolato; 4. Metodologie analitiche per il controllo della qualità dell'aria; 5. Inquinamento atmosferico e beni culturali.
1	<p>Cicli biogeochimici della biosfera:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Ciclo del carbonio; 2. Ciclo dell'ossigeno; 3. Ciclo dell'azoto; 4. Ciclo dello zolfo.
3	<p>Chimica delle acque: Caratteristiche chimico fisiche;</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Ciclo dell'acqua; 2. Acque superficiali; 3. Acque sotterranee; 4. Acque di mare; 5. Acque per usi vari.
4	<p>Parametri che caratterizzano i sistemi idrici: Caratteristiche organolettiche;</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Caratteristiche Chimico-fisiche (pH, temperatura, conducibilità) 2. Acidità; 3. Alcalinità; 4. Durezza (totale, temporanea, permanente); 5. Cloruri; 6. Solfati; 7. Metodologie analitiche per le acque.
3	<p>Inquinamento delle acque:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Ossigeno disciolto; 2. BOD; 3. COD; 4. Oli e grassi;
1	<p>Trattamento delle acque:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Clorazione; 2. Depurazione degli scarichi urbani; 3. Trattamenti biologici; 4. Allontanamento dei metalli.
1	<p>Rifiuti:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. I rifiuti solidi urbani; 2. Classificazione; 3. Smaltimento; 4. Cenni di legislazione.
2	<p>Danni degli inquinanti sui materiali:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Materiali lapidei 2. Metalli 3. Pigmenti
2	<p>Metodiche analitiche inerenti i BBCC:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Analisi termogravimetrica (malte, pigmenti, patine, ecc.) 2. Analisi gravimetrica (materiali lapidei, carbonati, ecc) 3. Spettroscopia di assorbimento atomico (pigmenti, ceramiche, vetri, ecc.) 4. Gascromatografia e cromatografia ad alta pressione 5. Termoluminescenza (datazione ceramiche).
	ESERCITAZIONI

8	Campionamento ed analisi aria laboratori
12	Analisi campione acqua (ossigeno disciolto, pH, Conducibilità elettrica, COD, Kubel, ecc.)
6	Preparazione di pigmenti e studio del comportamento agli inquinanti
4	Determinazione degli esteri ftalici in matrici ambientali
6	Determinazione dei metalli nelle varie fasi di sedimenti o suoli
6	Analisi gascromatografiche di leganti
3	Preparazione leganti e simulazione affresco
TESTI CONSIGLIATI	<p>Appunti di lezione S.E. Manahan – Chimica dell’Ambiente - Piccin Renato Cozzi, Pierpaolo Protti – Analisi Chimica – Zanichelli Campanella, Casoli, Colombini... La Chimica per l’Arte, Zanichelli</p>

FACOLTÀ	Scienze MM.FF.NN.
ANNO ACCADEMICO	2012/2013
CORSO DI LAUREA MAGISTRALE	Chimica
INSEGNAMENTO	Chimica dell' Ambiente e dei Beni Culturali con laboratorio
TIPO DI ATTIVITÀ	Caratterizzante (B)
AMBITO DISCIPLINARE	Discipline chimiche analitiche e ambientali
CODICE INSEGNAMENTO	15348
ARTICOLAZIONE IN MODULI	Si
NUMERO MODULI	2
SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI	CHIM/12
DOCENTE RESPONSABILE (MODULO 1: Chimica dell'ambiente)	Santino Orecchio Professore Associato Dipartimento di Chimica "S. Cannizzaro" Università degli Studi di Palermo
DOCENTE COINVOLTO (MODULO 2: Tecniche di indagine per i beni e ambientali)	Prof. Delia F. Chillura Martino Professore Associato Dipartimento di Chimica "S. Cannizzaro" Università degli Studi di Palermo
CFU	5+7
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	155
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE	145
PROPEDEUTICITÀ	Nessuna
ANNO DI CORSO	Secondo
SEDE	Dipartimento di Chimica
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali + Esercitazioni di laboratorio
MODALITÀ DI FREQUENZA	Facoltativa
METODI DI VALUTAZIONE	Test risposte multiple ed esercizi + Presentazione e discussione di un elaborato (tesina)
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
PERIODO DELLE LEZIONI	I Periodo
CALENDARIO DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE	Pubblicato sul sito del Corso di Laurea
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	Contattare preliminarmente il docente Prof. Santino Orecchio E-mail: santino.orecchio@unipa.it Telefono studio: 091 6451777 Cellulare: 3392029903 Prof. Delia F. Chillura Martino E-mail: delia.chilluramartino@unipa.it Telefono studio: 091 23897981 Cellulare: 3299472897

RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Conoscenza e capacità di comprensione

L'obiettivo del corso è di fornire i concetti di base per la definizione della composizione e delle caratteristiche chimiche degli ecosistemi naturali (acqua, aria, suolo, sedimenti). Inoltre il corso

fornisce i concetti di base per definire la composizione e le caratteristiche chimiche dei materiali inerenti i beni culturali; e definisce i principi fisici che regolano i fenomeni di interazione radiazione-materia al fine di potenziare le capacità di comprendere il linguaggio scientifico relativo a tecniche chimico fisiche non distruttive e microinvasive.

I concetti ambientali saranno elaborati nell'ottica dei cicli biogeochimici, al fine di individuare e definire i processi di inquinamento ambientale. Inoltre gli studenti devono acquisire gli strumenti per la progettazione e la redazione di una ricerca nel campo ambientale o in quello dei beni culturali, a partire dalle operazioni di campionamento fino all'elaborazione ed interpretazione dei risultati ed, eventualmente proporre soluzioni ed idee per la bonifica ambientale o per la caratterizzazione dei materiali adoperati per le opere d'arte e per il loro restauro. I concetti saranno elaborati nell'ottica dell'interazione dei materiali e delle opere con le sostanze presenti nell'ambiente, al fine di individuare e definire i processi di degrado.

Capacità di applicare conoscenza e comprensione

Capacità di definire:

le caratteristiche chimiche principali di un ecosistema naturale in termini di composizione e reattività;

le caratteristiche chimiche principali dei materiali utilizzati per le opere d'arte in termini di composizione e reattività.

Capacità di applicare le conoscenze, la capacità di comprensione e le abilità connesse all'utilizzo di tecniche chimico fisiche non distruttive e microinvasive ai fini della caratterizzazione di materiali di interesse ambientale e nei beni culturali, inseriti in contesti più ampi anche interdisciplinari.

Autonomia di giudizio

Essere in grado di individuare:

le interazioni tra i differenti comparti ambientali, facendo uso dei cicli biogeochimici;

i componenti antropogenici, con particolare riferimento al concetto di inquinamento;

interazioni tra i materiali e le differenti sostanze naturali ed antropiche presenti nell'ambiente;

i danni ai materiali, con particolare riferimento a quelli di origine antropica.

Valutare autonomamente le difficoltà applicative e i vantaggi derivanti dall'uso delle tecniche di indagine studiate. Dimostrare di avere la capacità di integrare le conoscenze e gestire la complessità, e formulare giudizi sulla base di informazioni limitate e incomplete.

Abilità comunicative

Essere in grado di esporre i concetti di base della chimica ambientale, integrandoli con il concetto di ciclo naturale (o biogeochimico) e di inquinamento dei vari comparti ambientali e quelli della chimica del restauro, integrandoli con il concetto di interazione con l'ambiente

Capacità di saper comunicare in modo chiaro e privo di ambiguità, anche a interlocutori non esperti, le proprie conclusioni e conoscenze.

Capacità d'apprendimento

Essere in grado di approfondire gli argomenti tramite articoli scientifici specifici della materia e di seguire seminari ed approfondimenti nell'ambito della chimica dell'ambiente.

OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO 1: Chimica dell'ambiente

Il corso si propone di fornire i concetti per la definizione della composizione e delle caratteristiche chimiche degli ecosistemi naturali (acqua, aria, suolo) e dei materiali impiegati nell'esecuzione di opere d'arte. I concetti saranno rielaborati nell'ottica dei cicli biogeochimici, al fine di definire i processi di inquinamento ambientale e, nel caso dei beni culturali, ad individuare le cause ed i processi di degrado.

OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO 2 “Tecniche di indagine per i beni e ambientali”

Il corso si propone di dare le nozioni necessarie per la comprensione dei principi su cui si basano alcune delle tecniche utilizzate nella diagnostica dei beni culturali e ambientali con particolare riguardo a quelle microscopiche non distruttive. Per i vari metodi di indagine trattati saranno indicati i campi di applicazione, i vantaggi, i limiti ed alcune applicazioni specifiche nel Campo dei Beni Culturali e Ambientali.

MODULO 1	Chimica dell'ambiente
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
2	Fasi salienti di una ricerca ambientale
2	Campionamento in ambienti naturali: Campionamento acque; Campionamento inquinanti atmosferici Campionamento suoli e sedimenti.
2	Chimica dell'atmosfera: 1. Le regioni dell'atmosfera; 2. Metodi di espressione delle concentrazioni dei gas nell'ambiente; 3. Composizione dell'atmosfera; 4. Strato di ozono; 5. Smog fotochimico; 6. Effetto serra.
1	Inquinamento atmosferico: 1. Ossidi di zolfo; 2. Ossidi di azoto; 3. Particolato; 4. Metodologie analitiche per il controllo della qualità dell'aria; 5. Inquinamento atmosferico e beni culturali.
1	Cicli biogeochimici della biosfera: 1. Ciclo del carbonio; 2. Ciclo dell'ossigeno; 3. Ciclo dell'azoto; 4. Ciclo dello zolfo.
3	Chimica delle acque: Caratteristiche chimico fisiche; 1. Ciclo dell'acqua; 2. Acque superficiali; 3. Acque sotterranee; 4. Acque di mare; 5. Acque per usi vari.
4	Parametri che caratterizzano i sistemi idrici: Caratteristiche organolettiche; 1. Caratteristiche Chimico-fisiche (pH, temperatura, conducibilità) 2. Acidità; 3. Alcalinità; 4. Durezza (totale, temporanea, permanente); 5. Cloruri; 6. Solfati; 7. Metodologie analitiche per le acque.
3	Inquinamento delle acque: 1. Ossigeno disciolto; 2. BOD; 3. COD; 4. Oli e grassi;
1	Trattamento delle acque: 1. Clorazione; 2. Depurazione degli scarichi urbani; 3. Trattamenti biologici; 4. Allontanamento dei metalli.
1	Rifiuti:

	<ol style="list-style-type: none"> 1. I rifiuti solidi urbani; 2. Classificazione; 3. Smaltimento; 4. Cenni di legislazione.
2	<p>Danni degli inquinanti sui materiali:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Materiali lapidei 2. Metalli 3. Pigmenti
2	<p>Metodiche analitiche inerenti i BBCC:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Analisi termogravimetrica (malte, pigmenti, patine, ecc.) 2. Analisi gravimetrica (materiali lapidei, carbonati, ecc) 3. Spettroscopia di assorbimento atomico (pigmenti, ceramiche, vetri, ecc.) 4. Gascromatografia e cromatografia ad alta pressione 5. Termoluminescenza (datazione ceramiche).
	ESERCITAZIONI
8	Campionamento ed analisi aria laboratori
12	Analisi campione acqua (ossigeno disciolto, pH, Conducibilità elettrica, COD, Kubel, ecc.)
6	Preparazione di pigmenti e studio del comportamento agli inquinanti
4	Determinazione degli esteri ftalici in matrici ambientali
6	Determinazione dei metalli nelle varie fasi di sedimenti o suoli
6	Analisi gascromatografiche di leganti
3	Preparazione leganti e simulazione affresco
TESTI CONSIGLIATI	<p>Appunti di lezione S.E. Manahan – Chimica dell’Ambiente - Piccin Renato Cozzi, Pierpaolo Protti – Analisi Chimica – Zanichelli Campanella, Casoli, Colombini.... La Chimica per l’Arte, Zanichelli</p>
MODULO 2	Tecniche di indagine per i beni e ambientali
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
1	Finalità del corso. Modalità di esame.
1	Interazione radiazione- materia: richiami.
6	Principi fisici della diffrazione di raggi X (XRD). Interpretazione di un diffrattogramma utilizzando metodi di elaborazione avanzati. Applicazione allo studio di materiali di interesse nel campo dei Beni Culturali e Ambientali.
4	Principi fisici della Spettroscopia di fluorescenza di raggi X. Applicazione allo studio composizionale di materiali di interesse nel campo dei Beni Culturali e Ambientali
4	Principi fisici della Microscopia Elettronica a Scansione e a Trasmissione. Applicazione allo studio morfologico di materiali di interesse nel campo dei Beni Culturali e Ambientali
	ESERCITAZIONI
20	Analisi diffrattometrica su campioni di interesse archeologico e ambientale. Acquisizione dei diffrattogrammi e loro elaborazione. Stesura di una relazione.
20	Indagine composizionale (elementale) mediante spettroscopia di fluorescenza X su campioni di interesse in campo ambientale e dei beni culturali. Acquisizione degli spettri e loro elaborazione. Stesura di una relazione.
20	Acquisizione di micrografie SEM e TEM da campioni di interesse in campo ambientale e dei beni culturali. Preparazione dei campioni, acquisizione delle immagini. Stesura di una relazione.
TESTI CONSIGLIATI	<p>A) X-ray Diffraction, B. E. Warren, Dover Publication Inc. B) Fluorescenza X, Seccaroni e Moioli, Nardini Ed. C) La Diagnostica nei Beni Culturali - Moderni Metodi di Indagine, L. Paolillo e I. Giudicianni, Loghia Ed.</p>

FACOLTÀ	Scienze MM.FF.NN.
ANNO ACCADEMICO	2012/2013
CORSO DI LAUREA MAGISTRALE	Chimica
INSEGNAMENTO	Chimica Fisica dei Sistemi Microeterogenei
TIPO DI ATTIVITÀ	Affine
AMBITO DISCIPLINARE	Attività formative affini o integrative
CODICE INSEGNAMENTO	15349
ARTICOLAZIONE IN MODULI	SI
NUMERO MODULI	2
SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI	CHIM/02
DOCENTE RESPONSABILE (MODULO 1)	Prof. Eugenio Caponetti Professore Ordinario Dipartimento di Chimica "S. Cannizzaro" – Università degli Studi di Palermo
DOCENTE COINVOLTO (MODULO 2)	Prof. Carmelo Sbriziolo Professore Associato Dipartimento di Chimica "S.Cannizzaro" – Università degli Studi di Palermo
CFU	4+2
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	88
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE	62
PROPEDEUTICITÀ	Nessuna
ANNO DI CORSO	Secondo
SEDE DI SVOLGIMENTO DELLE LEZIONI	Aula B, Laboratori Chimici ed. 17
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali, Esercitazioni di laboratorio
MODALITÀ DI FREQUENZA	Obbligatoria
METODI DI VALUTAZIONE	Valutazione delle relazioni di laboratorio, Prova Orale
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
PERIODO DELLE LEZIONI	I periodo
CALENDARIO DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE	Pubblicato sul sito del corso di Laurea
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	Venerdì dalle 9.00 alle ore 11.00.

RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Conoscenza e capacità di comprensione

Conoscenza e capacità di comprensione dei principi chimico-fisici che regolano le proprietà dei sistemi microeterogenei al fine di applicare idee originali in un contesto di ricerca.

Capacità di applicare conoscenza e comprensione

Capacità di applicare le conoscenze, la capacità di comprensione e le abilità nel risolvere i problemi connessi alla formulazione di sistemi microeterogenei, inseriti in contesti più ampi anche interdisciplinari.

Autonomia di giudizio

Dimostrare di avere la capacità di integrare le conoscenze e gestire la complessità, e formulare giudizi sulla base di informazioni limitate e incomplete.

Abilità comunicative

Capacità di saper comunicare in modo chiaro e privo di ambiguità, anche a interlocutori non esperti, le proprie conclusioni e conoscenze.

Capacità d'apprendimento

Avere sviluppato le capacità di apprendimento che consentono di continuare a studiare in modo autonomo.

OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO 1 "COLLOIDI LIOFOBI"

Il corso si propone di approfondire alcune tematiche inerenti i sistemi microeterogeni. In particolare si intendono approfondire i concetti chimico-fisici correlati alle proprietà strutturali e spettroscopiche di materiali nanostrutturati. Inoltre verranno richiamati i principi fisici e le metodologie di applicazione di alcune tecniche di indagine strutturale. Le esercitazioni di laboratorio si propongono di affrontare problematiche sperimentali connesse alla caratterizzazione strutturale e spettroscopica dei materiali nanostrutturati.

MODULO 1	COLLOIDI LIOFOBI
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
1	Finalità del corso. Modalità di esame.
3	Sistemi nanostrutturati: nanoparticelle e materiali porosi.
2	Compositi nanostrutturati
4	Principi fisici della Risonanza Magnetica Nucleare a Stato Solido. Applicazione allo studio di sistemi nanostrutturati
3	Principi fisici della diffusione di raggi X a Basso Angolo (SAXS). Applicazione allo studio di sistemi nanostrutturati
3	Principi fisici della Microscopia Elettronica a Scansione e a Trasmissione. Applicazione allo studio di sistemi nanostrutturati
	ESERCITAZIONI
	Studio strutturale di un composito grafeni-polivinilene mediante:
4	NMR a stato solido
4	TEM
4	SAXS.
3	Discussione dei risultati ottenuti mediante le tre tecniche di indagine
TESTI CONSIGLIATI	A) Materiale fornito dal docente. B) Articoli scientifici. C) Douglas A. Skoog, Chimica analitica strumentale D) André Guinier, Gérard Fournet, Small-angle scattering of X-rays

OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO 2 "COLLOIDI LIOFILFI"

Il corso si propone di approfondire alcune tematiche inerenti i sistemi microeterogenei. Il secondo modulo in particolare intende fornire una conoscenza approfondita degli aspetti teorici, applicativi e sperimentali dei colloidi liofilfi, utilizzando particolari metodologie e attrezzature.

MODULO 2	COLLOIDI LIOFILFI
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
1	Aspetti generali e scopi del corso. Illustrazione dei contenuti del corso
5	Equazioni fondamentali delle interfasi Tensione interfacciale e sua determinazione sperimentale. Equazione di Laplace. Equazione di Kelvin. Bagnabilità. Angolo di contatto. Equazione di Young-Duprè. Isoterma di Gibbs. Isoterma di adsorbimento all'interfaccia solido/liquido
3	I tensioattivi: struttura, aggregati e proprietà interfacciali. Significato chimico fisico ed importanza applicativa della cmc. Uso di tensioattivi come detergenti e/o agenti bagnanti: scelta e calcolo della concentrazione di tensioattivo da impiegare.
5	Tecniche sperimentali per la determinazione della cmc: tensione superficiale, conducibilità e solubilità di un additivo idrofobo in acqua in presenza di un tensioattivo. Aspetti

	termodinamici del processo di aggregazione di un tensioattivo: entalpia, entropia ed energia libera di micellizzazione
2	Cmc di miscele di tensioattivi: caso ideale e reale. Aspetti applicativi: tensioattivi anionici, cationici e non-ionici.
	ESERCITAZIONI
8	Determinazione sperimentale della cmc di un tensioattivo con il metodo conduttometrico
4	Elaborazione e discussione dei dati
3	Analisi di un articolo scientifico
TESTI CONSIGLIATI	A) Materiale fornito dal docente. B) Articoli scientifici.

FACOLTÀ	Scienze MM. FF. NN.
ANNO ACCADEMICO	2012-2013
LAUREA MAGISTRALE	Laurea Magistrale in Chimica
INSEGNAMENTO	Struttura e Stereochimica delle Sostanze Naturali
TIPO DI ATTIVITÀ	Affine
AMBITO DISCIPLINARE	Attività formative affini o integrative
CODICE INSEGNAMENTO	15357
ARTICOLAZIONE IN MODULI	SI
NUMERO MODULI	2
SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI	CHIM/06
DOCENTE RESPONSABILE (MODULO 1- Stereochimica)	Francesco Giacalone RU non confermato Università degli studi di Palermo
DOCENTE COINVOLTO (MODULO 2 - Sostanze Naturali)	Sergio Rosselli RU Università degli studi di Palermo
CFU	6
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	102
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE	48
PROPEDEUTICITÀ	Nessuna
ANNO DI CORSO	Secondo
SEDE DI SVOLGIMENTO DELLE LEZIONI	Aula B, Dipartimenti Chimici, Ed. 17
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali
MODALITÀ DI FREQUENZA	Facoltativa
METODI DI VALUTAZIONE	Prova Orale
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
PERIODO DELLE LEZIONI	Primo semestre
CALENDARIO DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE	Stereochimica Lunedì -Venerdì 11-12 Sostanze Naturali Lunedì -Venerdì 12-13
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	Dr. S. Rosselli Lunedì, Mercoledì Ore 10-11 Dr. F. Giacalone Lunedì, Mercoledì Ore 11-13

RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Conoscenza e capacità di comprensione

Acquisizione delle nozioni sugli elementi di simmetria molecolare e loro riconoscimento in molecole naturali appartenenti a varie classi strutturali. Comprensione delle problematiche stereochimiche e ricadute spettroscopiche nello studio di molecole complesse. Capacità di utilizzare la terminologia specifica per indicare i tipi di isomeria e gli elementi connessi.

Capacità di applicare conoscenza e comprensione

Capacità di riconoscere i tipi di isomeria molecolare e indicare le proprietà delle molecole. Individuare le principali classi di molecole naturali e conoscenza del loro percorso biosintetico.

Autonomia di giudizio

Essere in grado di prevedere le caratteristiche stereochimiche di processi molecolari e individuare le tecniche più adatte per mettere in risalto gli isomeri.

Abilità comunicative

Capacità di usare il linguaggio scientifico più appropriato per la descrizione delle molecole naturali.

Capacità d'apprendimento

Capacità di comprensione di testi scientifici inerenti la biosintesi e la sintesi di molecole naturali e della terminologia stereochimica.

OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO “STEREOCHIMICA”

Obiettivo del modulo è quello di conoscere quali elementi di simmetria e/o di chiralità sono presenti in una molecola ed i tipi di interazioni delle molecole chirali sia dal punto di vista statico che dinamico.

MODULO	STEREOCHIMICA
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
4	Rappresentazioni molecolari. Elementi ed operazioni di simmetria.
1	Struttura molecolare: lunghezza di legame, angoli di legame, angoli diedro.
2	Classificazioni di strutture isomere.
2	Stereoisomeria. Stereoisomeria per un singolo centro e per più centri chinali.
3	Stereoisomeria per assi o piani di chiralità. Stereoisomeria per elicità.
3	Isomeria torsionale attorno a doppi legami C=C, C=N, N=N ed attorno a legami semplici. Stereoisomeria in composti ciclici
3	Prostereoisomeria: gruppi e facce omotopiche, enantiotopiche e diastereotopiche.
3	Metodologie stereochimiche: metodi fisici e metodi chimici.
3	Discriminazione, determinazione e sintesi di stereoisomeri.
	ESERCITAZIONI
TESTI CONSIGLIATI	B. TESTA – Principles of organic stereochemistry – M. DEKKER, INC. NEW YORK. M. NOGRADI – Stereochemistry: Basic concepts and applications. PERGAMON PRESS. G. HALLAS – Organic stereochemistry. E. L. ELIEL – Stereochemistry of organic compounds. JOHN WILEY & SONS, INC. M. North - Principles and applications of stereochemistry – Stanley THORNESS.R. Buxton, S. M. Roberts – Guide to Organic Stereochemistry - LONGMAN

OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO “SOSTANZE NATURALI”

Obiettivo del modulo è quello di conoscere le varie tipologie e i relativi percorsi biosintetici delle molecole naturali con particolare attenzione al riconoscimento ed identificazione di stereoisomeri. Conoscenza dei vari problemi stereochimici in molecole naturali

MODULO	SOSTANZE NATURALI
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
5	Via biogenetica dell'acido acetico ed esempi di metaboliti correlati.
5	Via biogenetica dell'acido mevalonico ed esempi di metaboliti correlati.
5	Via biogenetica dell'acido shikimico ed esempi di metaboliti correlati.
2	Conseguenze spettroscopiche dell'esistenza di diastereoisomeri.
2	Determinazione della configurazione assoluta di un alcol secondario.
1	Risoluzione mediante sali diastereoisomerici.
2	Correlazioni NMR per la determinazione della configurazione relativa.
2	Esempi di processi stereospecifici
	ESERCITAZIONI
TESTI CONSIGLIATI	P. M. Dewick, <i>Chimica, biosintesi e bioattività delle sostanze naturali</i> , Piccin, 2001 Appunti di lezione