



UNIVERSITÀ
degli STUDI
di CATANIA

DIPARTIMENTO DI SCIENZE CHIMICHE

Corso di laurea magistrale in Scienze chimiche

Anno accademico 2020/2021 - 1° anno - Curriculum Chimica
Biomolecolare

METODI PER LO STUDIO DI SISTEMI BIOINORGANICI

CHIM/03 - 6 CFU - 2° semestre

Docente titolare dell'insegnamento

GRAZIELLA VECCHIO

Email: gr.vecchio@unict.it

Edificio / Indirizzo: Viale A. Doria 6

Telefono: 0957385064

Orario ricevimento: E' possibile concordare il ricevimento tutti i giorni, anche in modalità telematica

OBIETTIVI FORMATIVI

Conoscenza e capacità di comprensione:

Conoscenza delle tecniche per lo studio delle biomolecole e dei sistemi bioinorganici

Conoscenza e capacità di comprensione applicate:

Capacità di applicare le conoscenze acquisite per interpretare i dati sperimentali e proporre tecniche di caratterizzazione di biomolecole

Autonomia di giudizio:

Capacità di interpretazione critica dei dati ottenute mediante le tecniche discusse nel corso.

Abilità comunicative:

Acquisire proprietà di linguaggio nella descrizione dei principi e delle applicazioni delle tecniche apprese.

Capacità di apprendere:

Sviluppare le competenze necessarie mediante la partecipazione alle lezioni e lo studio dal materiale fornito e approfondire le conoscenze acquisite nell'ambito della caratterizzazione delle biomolecole.

MODALITÀ DI SVOLGIMENTO DELL'INSEGNAMENTO

Lezioni frontali di teoria e di esercitazioni sugli argomenti trattati con la partecipazione degli studenti.

Qualora l'insegnamento venisse impartito in modalità mista o a distanza potranno essere introdotte le necessarie variazioni, al fine di rispettare il programma previsto e riportato nel syllabus.

PREREQUISITI RICHIESTI

Chimica di base

Fisica di base

Chimica inorganica

FREQUENZA LEZIONI

In considerazione della didattica attiva che prevede la partecipazione degli studenti durante lo svolgimento delle lezioni, la costante frequenza delle lezioni è vivamente consigliata.

CONTENUTI DEL CORSO

Spettroscopia di dicroismo circolare. Teoria dell'attività ottica. Regole di selezione. Accoppiamento eccitonico. Accoppiamento statico e dinamico. Regola dell'ottante. Spettri CD di biomolecole.

Spettroscopie XAS. Principi. Applicazioni della spettroscopia EXAFS per lo studio di metallo proteine.

Le basi fisiche della spettroscopia NMR. Momento nucleare angolare e magnetico. Nuclei in un campo magnetico statico.

Principi di base dell'esperimento NMR. Le condizioni di risonanza. L'impulso. Il rilassamento. La trasformata di Fourier.

Chemical Shift. Influenza della densità di carica sul chemical shift. Corrente d'anello.

Costanti di Accoppiamento. Equivalenza, simmetria e chiralità (sistemi omotropici, enantiotopici e diastereotopici). Notazione per i sistemi di spin. Regole di molteplicità. Dipendenza della costante di accoppiamento dall'angolo di legame.

Esperimenti di doppia risonanza. Semplificazione dello spettro attraverso disaccoppiamento selettivo. Effetto NOE. Disaccoppiamento in ^{13}C NMR.

Spettroscopia NMR 2D. Acquisizione dei dati. Rappresentazione grafica. Tecniche COSY. TOCSY, ETCOR, NOESY e ROESY. Cenni sul NMR 3D e 4D per lo studio di proteine.

Equilibri di scambio. Tecniche per lo studio dei processi di scambio.

MRI. Principi e agenti di contrasto utilizzati.

EPR. Principi e applicazioni

TESTI DI RIFERIMENTO

The Basics of NMR by J.P. Hornak *Hypertext based NMR course*
<http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/nmr-main.htm>

Horst Friebolin *Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy* Wiley.VCH

Alison Rodger, Bengt Nordén *Circular Dichroism and Linear Dichroism* Oxford University Press

Materiale fornito dal docente

ALTRO MATERIALE DIDATTICO

<http://studium.unict.it>

PROGRAMMAZIONE DEL CORSO

Argomenti	Riferimenti testi
1 Introduzione ai metodi per lo studio dei sistemi bioinorganici.	
2 Spettroscopia di dicroismo circolare. Teoria dell' attività ottica. Regole di selezione. Accoppiamento eccitonico. Accoppiamento statico e dinamico. Regola dell'ottante. Spettri CD di biomolecole.	
3 Le basi fisiche della spettroscopia NMR. Momento nucleare angolare e magnetico. Nuclei in un campo magnetico statico.	
4 Principi di base dell' esperimento NMR. Le condizioni di risonanza. L' impulso. Il rilassamento. La trasformata di Fourier.	
5 Chemical Shift. Influenza della densità di carica sul chemical shift. Corrente d'anello.	
6 Costanti di Accoppiamento. Equivalenza, simmetria e chiralità (sistemi omotropici, enantiotropici e diastereotropici). Notazione per i sistemi di spin. Regole di molteplicità. Dipendenza della costante di accoppiamento dall' angolo di legame.	
7 Esperimenti di doppia risonanza. Semplificazione dello spettro attraverso disaccoppiamento selettivo. Effetto NOE. Disaccoppiamento in ¹³ C NMR.	
8 Spettroscopia NMR 2D. Acquisizione dei dati. Rappresentazione grafica. Tecniche COSY, TOCSY, ETCOR, NOESY e ROESY. Cenni sul NMR 3D e 4D per lo studio di proteine.	
9 Equilibri di scambio. Tecniche per lo studio dei processi di scambio.	
10 Studio di sistemi contenenti ioni metallici.	
11 MRI. Principi e agenti di contrasto utilizzati.	
12 Spettroscopie XAS. Principi. Applicazioni della spettroscopia EXAFS per lo studio di metallo proteine.	

VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

L'apprendimento verrà verificato durante il corso mediante esercitazioni in aula e mediante un esame finale.

L'esame finale consiste in una prova scritta ed una prova orale.

La prova scritta è costituita da esercizi applicativi per lo più a risposta aperta.

Dopo il superamento della prova scritta (con un voto almeno di 18/30) si potrà sostenere la prova orale, che si basa su chiarimenti dello scritto e su altre domande di verifica.

La votazione finale tiene conto dei voti attribuiti a tutte le prove.

Nel caso in cui si dovessero adottare le modalità di lezioni e di esami a distanza, le procedure descritte verranno applicate anche da remoto.

ESEMPI DI DOMANDE E/O ESERCIZI FREQUENTI

Saranno discussi con il docente e disponibili su studium
