



UNIVERSITÀ  
DEGLI STUDI  
FIRENZE

DIPARTIMENTO  
DI CHIMICA  
"UGO SCHIFF"

DOTTORATO DI RICERCA IN  
SCIENZE CHIMICHE

Il Coordinatore

## Collegio dei Docenti del Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche

### Verbale della riunione del 04/12/2014

Il Collegio dei Docenti del Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche si riunisce nella Biblioteca lato organica del Dipartimento di Chimica "Ugo Schiff" alle ore 12.45 del 4/12/14 con il seguente ordine del giorno:

1. Comunicazioni
2. Approvazione verbali
3. Didattica anno 2015
4. Richieste valutazione compatibilità corso di Dottorato con altre attività
5. Varie ed eventuali

Il numero legale viene raggiunto alle ore 12.50

Sono indicati con P i presenti con G gli assenti giustificati.

Baglioni Piero	P
Bencini Andrea	G
Bianchi Antonio	P
Bonini Massimo	P
Brandi Alberto	P
Capperucci Antonella	G
Cardini Gianni	P
Cincinelli Alessandra	P
Costagliola Pilario	
Dei Luigi	G
Del Bubba Massimo	G
Felli Isabella	P
Fragai Marco	
Fratini Emiliano	P
Giorgi Rodorico	G
Goti Andrea	P
Guarna Antonio	G
Lo Nostro Pierandrea	P
Mandò Pier Andrea	
Marrazza Giovanna	P

Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche

Prof. Andrea Goti, Coordinatore

Via della Lastruccia, 3/13 – 50019 Sesto Fiorentino (FI), Italy

Phone (direct): +39 055 4573505; fax: + 39 055 4573531; e-mail: [andrea.goti@unifi.it](mailto:andrea.goti@unifi.it)

P.IVA | Cod. Fis. 01279680480



Menichetti Stefano	
Messori Luigi	G
Minunni Maria	G
Mordini Alessandro (ICCOM-CNR)	G
Occhiato Ernesto Giovanni	G
Papini Anna Maria	G
Procacci Piero	
Salvini Antonella	P
Sessoli Roberta	P
Smulevich Giulietta	G
Sorace Lorenzo	P
Udisti Roberto	

Rappresentanti degli studenti:

Poggini Lorenzo	P
Massai Lara	

Presiede la seduta il Prof. Andrea Goti

Assume le funzioni di segretario verbalizzante il Dott. Roberto Di Camillo

## 1. Comunicazioni

- si sono completate le iscrizioni al XXX ciclo di Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche: gli iscritti sono 17, di cui 3 soprannumerari; 15 sono iscritti al curriculum Chimica e 2 al curriculum Scienza per la Conservazione dei Beni Culturali
- Jorge Tovar Rodriguez, che si era iscritto come vincitore senza borsa al XXIX ciclo chiedendo l'autorizzazione a posticipare l'inizio del corso di dottorato, è risultato vincitore di una borsa del CONACYT per tutta la durata del corso di dottorato ed ha comunicato di iniziare la frequenza a partire da settembre 2014; verrà accorpato come scadenze con i dottorandi del XXX ciclo
- Tatiana Vitorino, che si era iscritta come vincitore senza borsa al XXIX ciclo chiedendo l'autorizzazione a posticipare l'inizio del corso di dottorato, ha comunicato di rinunciare alla prosecuzione
- si sono svolti i colloqui per l'ammissione dei dottorandi del XXVII ciclo all'esame finale e sono state approvate le Commissioni per gli esami finali
- oggi pomeriggio i Coordinatori dei corsi di dottorato sono stati convocati ad una riunione presso il Rettorato alla presenza del Rettore, con all'OdG i problemi dei corsi di dottorato e le formalità per l'attivazione del XXXI ciclo

## 2. Approvazione verbali



Viene messo in approvazione il verbale del 03/11/2014.  
Approvato all'unanimità

Viene messo in approvazione il verbale del 17/11/2014.  
Approvato all'unanimità

### **3. Didattica anno 2015**

Il coordinatore ha inviato per e-mail le proposte di corsi per il dottorato da tenersi nel 2015. Sono state perfezionate 15 proposte, così distribuite per SSD indicando il SSD prevalente perché vari corsi sono a carattere interdisciplinare: 2 CHIM/01, 3 CHIM/02, 5 CHIM/03, 1 CHIM/04, 2 CHIM/06, 2 FIS/07.

Inoltre è stato richiesto da CSAVRI un parere preventivo riguardo l'offerta di un corso su brevettazione, proprietà intellettuale e contenuti correlati, che è stato tenuto già nel 2014 solo per i dottorati di area Tecnologica, che sarebbe obbligatorio per i dottorandi del I anno di corso. Il coordinatore riferisce di avere riferito l'interesse del dottorato per un corso del genere, che sia però raccomandato ai dottorandi piuttosto che reso obbligatorio, e in tal senso hanno risposto altri coordinatori, soprattutto di area Scientifica. Nel caso sia attivato un corso su tali contenuti questo verrà aggiunto nell'offerta agli altri corsi.

Il coordinatore mette in approvazione i corsi proposti (vedi Allegato).

Approvati all'unanimità

Il Coordinatore comunica che in seguito ad una circolare firmata dal Rettore riguardante il consuntivo dell'attività fornita dai docenti e in accordo col Direttore del Dipartimento, a partire dal 2015 l'attività didattica svolta nel corso di dottorato sarà regolarizzata su registro e consuntivo che saranno controfirmati dal Direttore del Dipartimento e conseguentemente l'offerta didattica sarà portata anche all'approvazione del Consiglio di Dipartimento.

### **4. Richieste valutazione compatibilità corso di Dottorato con altre attività**

Serena Cinotti, XXVIII ciclo, tutore Massimo Innocenti, chiede di poter svolgere attività retribuita con contratto part-time a tempo indeterminato per 8 ore settimanali presso l'azienda Bluclad srl. Il tutore, ritenendo che tale attività non pregiudichi in modo sostanziale l'attività della dottoranda e sia inerente le sue attività di ricerca, si è espresso favorevolmente all'accoglimento della richiesta.

Approvato all'unanimità

Monica Tonelli, dottoranda senza borsa del XXX ciclo, chiede la valutazione della compatibilità con lo svolgimento di attività lavorativa retribuita con contratto di collaborazione coordinata e continuativa per le esigenze dei laboratori didattici dell'insegnamento Chimica per la biologia del Corso di Laurea in Scienze Biologiche per il periodo da ottobre 2014 a giugno 2015. Il tutore è favorevole.



UNIVERSITÀ  
DEGLI STUDI  
FIRENZE

DIPARTIMENTO  
DI CHIMICA  
"UGO SCHIFF"

Approvato all'unanimità

Chiara Berlangieri, XXX ciclo, chiede l'autorizzazione a svolgere prestazione occasionale consistente in attività di operatore Open Lab per il periodo da ottobre 2014 a dicembre 2015.

Il tutore è favorevole.

Approvato all'unanimità

### **13. Varie ed eventuali**

Nessuna.

Non essendoci altri argomenti in discussione la seduta termina alle ore 13.15.

Il Segretario Verbalizzante  
Dott. Roberto Di Camillo

Il Coordinatore  
Prof. Andrea Goti

## ALLEGATO

2015

Febbraio

C. Analitica CHIM01

1

**Ilaria Palchetti** [ilaria.palchetti@unifi.it](mailto:ilaria.palchetti@unifi.it)  
**Dr.ssa Galarini** (seminario)

### **Nanomaterials and other environmental emerging contaminants: the analytical approach**

**Course description:** The course will cover the analytical approach to the determination of some emerging contaminants like engineered nanomaterials, microorganisms and prions. Prions are infectious particles composed of a protein in a misfolded form, which are responsible for several fatal neurodegenerative diseases also in human, and which are claimed to be contaminants at the horizon. Moreover, special emphasis will be devoted to the analysis of veterinary pharmaceutical residues with a seminar of an expert in the field.

### **Nanomateriali ed altri contaminanti ambientali emergenti: l'approccio analitico**

**Descrizione del corso:** Il corso si propone di introdurre il problema ambientale e l'approccio analitico alla determinazione di alcuni contaminanti emergenti quali ad esempio i nanomateriali, alcuni microorganismi, ed i prioni. Inoltre, speciale enfasi verrà attribuita alla determinazione di residui di farmaci veterinari con l'intervento di un esperto del settore.

**Periodo:** Febbraio

**Numero di studenti:** --

**Metodo di valutazione:** lettura critica e discussione di un articolo scientifico sugli argomenti del corso

Chim. Fisica CHIM02

1

Chim. Fisica CHIM02 , CHIM/01 (CHIMICA ANALITICA), IND/22 (SCIENZA E TECNOLOGIA DEI MATERIALI)

**Dr. Maurizio Muniz-Miranda** [maurizio.muniz@unifi.it](mailto:maurizio.muniz@unifi.it)

### **Nuovi Materiali Nanostrutturati per Applicazioni Catalitiche, Ambientali e Biomediche**

**Descrizione del corso:** La ricerca di nuovi materiali nanostrutturati è una esigenza urgente nello studio di reazioni catalitiche eterogenee, nella rilevazione e rimozione di inquinanti ambientali e in applicazioni biomediche, come "drug delivery" e attività antibatterica.

**Novel Nanostructured Materials for Catalytic, Environmental and Biomedical Applications"**Course description: The search for new nanostructured materials is an urgent need in the study of heterogeneous catalytic reactions, in the detection and removal of

environmental pollutants and in biomedical applications, such as drug delivery and antibacterial activity.

**Periodo:** Febbraio

**Numero minimo di studenti per l'attivazione:** 2

**Metodo di valutazione:** *esame orale*

2

**Dr. Santiago Sanchez-Cortes** s.sanchez.cortes@csic.es  
**Instituto de Estructura de la Materia. CSIC. Serrano, 121. Madrid. Spain**

### **Nanobiospectroscopy: Bioanalysis and Sensitive Molecular Detection**

**Course description:** Plasmonics is based on the interaction of light with materials in the nanoscale. The large local enhancements of the incident electromagnetic field in the proximity of nanostructured metals, as a consequence of the localized surface plasmon resonance (LSPR) have advanced applications in photonics, electronics and optical spectroscopy. In particular the course will be focused on the study of the Surface-Enhanced Raman scattering (SERS) and Surface-Enhanced Fluorescence (SEF) techniques. This course will display potential applications of SERS and SEF in biodiagnosis and, in general, molecular sensing at trace concentrations. The contents of the lectures will be specifically focused on important processes related to surface-enhanced optical spectroscopy, such as nanofabrication, functionalization and practical application in the detection of biomolecules and environmental pollutants.

**Periodo:** Febbraio

**Numero di studenti:** 6

**Metodo di valutazione:** esame orale o lettura critica e discussione di articolo scientifico (con il Dr. Alessandro Feis)

**Chim. Inorganica CHIM03 / Chim. Fisica CHIM02**

1

**Andrea Rossin – ICCOM CNR** a.rossin@iccom.cnr.it

### **Physical and chemical hydrogen/carbon dioxide storage: from the main greenhouse gas sequestration to a carbon-free renewable energy vector**

**Course description:** Porosimetry (2 h): origin of a material porosity, pore classification (IUPAC), specific surface area, Langmuir and BET adsorption isotherms,  $t$ -plot, theoretical models for the description of pore size distribution (BJH, DFT), absolute and excess adsorption.

Physical gas storage in metal-organic frameworks (MOFs) (3 h): MOF synthesis, main organic spacers and inorganic secondary building units description, lattice topologies and examples in H<sub>2</sub> and CO<sub>2</sub> storage.

Chemical hydrogen storage in ammonia-borane (AB) (3 h): AB as hydrogen storage material, homogeneously catalyzed AB dehydrogenation mediated by  $d$ -block organometallics. Classical and non-classical transition metal hydrides: syntheses, characterization and reactivity. Description of the metal-hydrogen bonding. AB composites with carbon-based materials and MOFs, as solid-state hydrogen storage systems.

### **Stoccaggio fisico e chimico di idrogeno e biossido di carbonio: dalla cattura del principale gas serra al passaggio ad un vettore energetico rinnovabile "carbon-free"**

**Descrizione del corso:** Porosimetria (2 h): origine della porosità di un materiale, classificazione dei pori (IUPAC), definizione di area superficiale specifica, isoterme di adsorbimento Langmuir e BET,  $t$ -plot, modelli teorici per la descrizione della distribuzione dei pori (BJH, DFT), adsorbimento

assoluto ed in eccesso.

Metal-organic frameworks (MOFs) come materiali per stoccaggio fisico di gas (3 h): sintesi, descrizione dei loro principali *spacers* organici e nodi metallici, topologia dei reticoli, applicazioni nello stoccaggio di H<sub>2</sub> e CO<sub>2</sub>.

Stoccaggio chimico di idrogeno nell'addotto ammoniaca-borano (3 h): ammoniaca-borano come materiale per stoccaggio chimico di idrogeno, catalisi omogenea di deidrogenazione di ammoniaca-borano mediata da complessi organometallici di metalli del blocco *d* (di transizione). Sintesi, reattività e caratterizzazione di idruri organometallici classici e non-classici. Natura del legame metallo-idrogeno. Materiali compositi di AB con strutture a base di carbonio e MOFs come sistemi solidi di stoccaggio chimico di H<sub>2</sub>

**Periodo:** febbraio

**Numero minimo di studenti per l'attivazione:** 15

**Metodo di valutazione:** orale

2

Dr. Federico Totti

[totti.federico@unifi.it](mailto:totti.federico@unifi.it)

### Orbital Interactions in Chemistry

**Course description:** The course will cover the construction and the role of the molecular orbital interactions from the basis to their operative applications. The reactivity and spectroscopic properties for both organic and inorganic species will be then studied in this framework. The aim of the course, therefore, is to make the student able to sketch the electronic structure of the species under study in order to understand and to predict certain reaction and/or spectroscopic behaviours.

### Interazioni Orbitaliche in Chimica

**Descrizione sintetica del contenuto del corso:** Il corso tratterà la costruzione e il ruolo delle interazioni orbitali molecolari dalla base alle loro applicazioni operative. La reattività e le proprietà spettroscopiche di specie organiche ed inorganiche saranno studiate contestualmente. L'obiettivo del corso è quello di mettere lo studente in condizione di delineare la struttura elettronica delle specie oggetto di studio al fine di comprendere e prevedere la loro reattività e le loro proprietà spettroscopiche.

**Periodo:** Febbraio

**Numero minimo di studenti per l'attivazione:** 2 studenti

**Metodo di valutazione:** Colloquio

### Chim. Organica CHIM06

1

Prof. Dr. David Díaz Díaz [David.Diaz@chemie.uni-regensburg.de](mailto:David.Diaz@chemie.uni-regensburg.de)

### Click Chemistry: A Versatile Tool for Materials Synthesis and Biotechnology

**Course description:** Over the last decade, click chemistry has taken a spectacular growth and became a highly creative area of research. Although the foundation of click chemistry had initially an eye on drug discovery, its applications to materials synthesis and biotechnology have been a shocking success story. This course will first provide an introduction of the concept of click chemistry and its potential value as a universal chemical ligation strategy. Synthetic capabilities and limitations of this type of chemistry will be discussed, along with the different applications in a range of important materials science and biotechnology areas.

### **Click Chemistry: Uno Strumento Versatile per la Sintesi e la Biotecnologia dei Materiali**

**Descrizione del corso:** Nell'ultimo decennio la "click chemistry" ha visto una crescita spettacolare, diventando un'area di ricerca altamente creativa. Sebbene lo sviluppo delle fondamenta della click chemistry sia stato inizialmente rivolto alla "drug discovery", la sua applicazione alla sintesi e biotecnologia dei materiali ha avuto una storia di straordinario successo. Lo scopo di questo corso e' principalmente quello di fornire un'introduzione al concetto di click chemistry ed al suo valore potenziale quale strategia universale di legatura chimica. Nel corso verranno discusse le potenzialita' sintetiche e le limitazioni di questo tipo di chimica, insieme con le differenti applicazioni in alcune aree di rilievo nella scienza e biotecnologia dei materiali.

**Periodo:** 23-27 Febbraio 2015.

**Numero minimo di studenti per l'attivazione:** -

**Metodo di valutazione:** *Lettura critica e discussione di articoli scientifici inerenti gli argomenti trattati nel corso. (con il Dr. Stefano Roelens)*

### **Fisica Applicata Fis07**

1

**Prof. Pier Andrea Mandò/** pierandrea.mando@unifi.it  
**Maria Elena Fedi**

### **X ray spectrometries for the diagnostics of Cultural Heritage**

**Course description:** The course will deal with the basic principles of compositional analysis of materials of interest in the field of Cultural Heritage, performed by means of X ray spectrometries (X Ray Fluorescence [XRF], PIXE [Particle-Induced X ray Emission]). A comparative examination of advantages and limitations of each technique will be made. A short description of the main instrumentation employed for this kind of analysis will also be given.

### **Spettrometrie X per la diagnostica dei Beni Culturali**

**Descrizione del corso:** Nel corso saranno esposti i principi alla base delle analisi di composizione di materiali di interesse nel campo dei beni culturali, basate sull'utilizzo di spettrometria X (X Ray Fluorescence [XRF], PIXE [Particle-Induced X ray Emission]), con una disamina comparata dei vantaggi e dei limiti di ciascuna tecnica. Saranno brevemente descritte le principali strumentazioni utilizzate per queste analisi.

**Periodo:** Febbraio

**Numero minimo di studenti per l'attivazione:** 3

**Metodo di valutazione:** *Esame orale o lettura critica e discussione di un articolo scientifico inerente argomenti trattati nel corso.*

2

**Prof. Pier Andrea Mandò/** pierandrea.mando@unifi.it  
**Maria Elena Fedi**

### **Radiocarbon dating for Archaeology and History of Art**

**Course description:** The course will first provide the schematic principles at the basis the method of radiocarbon dating, explain the sample preparation procedures, and the way measurements are performed using Accelerator Mass Spectrometry. Also discussed will be the recalibration that must be applied to the obtained results in order to correct for the simplified assumptions initially adopted, thus getting to a more accurate date.

### **Datazioni col radiocarbonio per l'archeologia e la storia dell'arte**

**Descrizione del corso:** Nel corso saranno esposti i principi schematici alla base delle datazioni



col metodo del radiocarbonio, le procedure di preparazione dei campioni, e quelle di misura con la tecnica della Accelerator Mass Spectrometry. Si discuteranno anche le correzioni di ricalibrazione che è necessario successivamente apportare ai risultati ottenuti, per tenere conto delle approssimazioni semplificate adottate inizialmente e arrivare a una datazione corretta.

**Periodo:** Febbraio

**Numero minimo di studenti per l'attivazione:** 3

**Metodo di valutazione:** *Esame orale o lettura critica e discussione di un articolo scientifico inerente argomenti trattati nel corso.*

## Settembre

### C. Analitica CHIM01

1

**Prof. Giovanna Marrazza**

[giovanna.marrazza@unifi](mailto:giovanna.marrazza@unifi)

#### **Recent advances in emerging techniques for food quality and safety**

**Course description:** The availability of high-quality food with respect to nutrition, freshness and food safety is a major issue for customers and legal authorities. Smart monitoring of nutrients and fast screening of biological and chemical contaminants are some of the key evolving issues challenging the assessment of food quality and safety. Good traceability systems help to minimize the production and distribution of unsafe or poor quality products, thereby minimizing the potential for bad publicity, liability, and recalls. Advances in materials science and nanotechnology, electromechanical and microfluidic systems, protein engineering and biomimetics design are boosting sensing technology from bench to market. The course will highlight current and future trends in analytical diagnostic tools focused on the food industry and target analytes to support healthier nutrition.

#### **Nuove tecniche analitiche per la qualità e la sicurezza alimentare**

**Descrizione del corso:** La disponibilità di cibo di alta qualità per quanto riguarda la nutrizione, la freschezza e la sicurezza alimentare è una problema importante per i consumatori e le autorità giudiziarie. Il monitoraggio dei nutrienti e lo screening veloce di contaminanti biologici e chimici costituiscono alcune delle principali questioni ancora aperte per la valutazione della qualità e della sicurezza alimentare. I sistemi di tracciabilità aiutano a minimizzare la produzione e la distribuzione di prodotti non sicuri o di scarsa qualità, permettendo da una parte di ridurre al minimo il potenziale per cattiva pubblicità e dall'altra di individuare l'eventuale responsabilità. I progressi ottenuti nel campo della scienza dei materiali, delle nanotecnologie, dell'elettromeccanica, dei sistemi microfluidici e dell'ingegneria biomolecolare hanno permesso di ottenere nuove tecnologie analitiche. Il corso metterà in evidenza le tendenze attuali e future degli strumenti analitici utilizzati nell'industria alimentare per selezionati analiti che aiutano ad avere una nutrizione più sana.

**Periodo:** Settembre

**Numero minimo di studenti per l'attivazione:** -

**Metodo di valutazione:** lettura critica e discussione di un articolo scientifico inerente argomenti trattati nel corso.

## Chim. Fisica CHIM02

1

Pier Remigio Salvi

piero.salvi@unifi.it

### **Aromaticity, antiaromaticity and Moebius aromaticity**

**Course description:** Cyclobutadiene, benzene e cicloottatetraene as archetypal structures of conjugated cyclic molecules. Aromatic stability and antiaromatic instability. Isodesmic and homodesmotic reactions. Excited states of cyclobutadiene and benzene. Benzene photochemistry. Pentalene. Higher annulenic structures, from [10]-annulene to [18]-annulene. Porphyrins. Moebius structures of conjugated cycles and stability.

### **Aromaticità, antiaromaticità e aromaticità di Moebius**

**Descrizione del corso:** Ciclobutadiene, benzene e cicloottatetraene come archetipi di strutture coniugate cicliche. Stabilità aromatica e instabilità antiaromatica. Reazioni isodesmiche e omodesmotiche. Stati eccitati del ciclobutadiene e del benzene. Fotochimica del benzene. Pentalene. Strutture annuleniche superiori, dal [10]-annulene al [18]-annulene. Porfirine. Strutture di Moebius di cicli coniugati e loro stabilità.

**Periodo:** Settembre

**Numero minimo di studenti per l'attivazione:** 4-5

**Metodo di valutazione:** lettura critica e discussione di un articolo scientifico sugli argomenti del corso

## Chim. Inorganica CHIM03

1

**Dr Luca Gonsalvi (ICCOM-CNR)**

[l.gonsalvi@iccom.cnr.it](mailto:l.gonsalvi@iccom.cnr.it);

**Dr Maria Caporali (ICCOM-CNR)**

[maria.caporali@iccom.cnr.it](mailto:maria.caporali@iccom.cnr.it)

### **Homogeneous Catalysis: principles and applications**

**Course description:** 1. Principles of Homogeneous Catalysis; 2. Homogeneous Catalytic Hydrogenations; 4. Homogeneous Catalytic Hydroformylations; 5. Methanol Carbonylation; 6. Examples of Homogeneous Catalysis in water and biphasic media; 7. Examples of Homogeneous Catalysis in ionic liquids, scCO<sub>2</sub>, fluorinated phase; 8. Hydrogen Production from Liquid Organic Hydrides by Homogeneous Catalysis.

The course will address the fundamental principles of homogeneous catalysis and highlight selected examples of applications to fine and bulk chemistry, including the use of sustainable and green solutions (alternative reaction media) and state-of-the-art for production and storage of hydrogen from a range of organic substrates.

**Periodo:** Settembre

**Numero minimo di studenti per l'attivazione:** 10

**Metodo di valutazione:** *lettura critica e discussione di un articolo scientifico inerente argomenti trattati nel corso*

Dr. Marco Fragai [fragai@cerm.unifi.it](mailto:fragai@cerm.unifi.it)  
Dr. Francesca Cantini [cantini@cerm.unifi.it](mailto:cantini@cerm.unifi.it)

### Structural methodologies to investigate biological mechanisms and to design drug/vaccine candidates

**Course description:** The course is focused on some strategies used to investigate biological processes driven by protein-protein interactions, and to develop candidate drugs and vaccines against bacterial pathogens. The course describes how the knowledge of the solution structure of proteins and protein-protein interaction data, obtained through NMR and X-ray studies, allow the designing of chimeric molecules able to induce high level of cross-protective antibodies against pathogens, and small molecules able to inhibit enzymes.

### Metodologie strutturali per lo studio di meccanismi biologici e per la progettazione di candidati farmaci e vaccini

**Descrizione del corso:** Il corso tratterà alcune strategie utilizzate per studiare processi biologici guidati da interazioni fra proteine e per lo sviluppo di candidati farmaci e vaccini contro batteri patogeni. Il corso descrive come le informazioni strutturali ottenute in soluzione e dati di interazione ottenuti da misure NMR e X-ray consentono la progettazione di proteine chimeriche capaci di indurre elevati livelli di anticorpi cross-protettivi contro patogeni e di piccole molecole in grado di inibire enzimi.

**Periodo:**

**Numero minimo di studenti per l'attivazione:**

**Metodo di valutazione:** orale

Dr.ssa M. Fittipaldi [maria.fittipaldi@unifi.it](mailto:maria.fittipaldi@unifi.it)  
Dr. L. Sorace [lorenzo.sorace@unifi.it](mailto:lorenzo.sorace@unifi.it)

### Paramagnetic Resonance: Fundamentals and applications

**Course description:** This group of lectures is aimed at providing the basic concepts needed to use and analyze the information which can be obtained by Electron Paramagnetic Resonance spectroscopy, while presenting some case studies of application of the different variants of this technique in Chemistry, Physics, Biology and Material Science.

The course is subdivided in two different modules, to be taught in September 2014 and September 2015. The two modules are independent on each other, but anybody interested in the second one -devoted to pulsed techniques- is strongly advised to follow also the first one, which is devoted to more general subjects.

The course will focus on the following topics:

*1<sup>^</sup> module (September 2014)*

*2<sup>^</sup> module (September 2015)*

Introduction to pulsed EPR spectroscopy; The Density Matrix; The magnetization in the sequences of pulses: spin echoes. Application of ENDOR, ESEEM, HYSCORE e ELDOR-detected NMR spectroscopy to measure hyperfine interactions. Structural determination by using pulsed EPR and spin labels.

## Fondamenti e applicazioni di Risonanza Paramagnetica Elettronica

**Descrizione del corso:** Scopo del corso è fornire le conoscenze necessarie all'utilizzo e alla comprensione delle informazioni ottenibili dalla spettroscopia di risonanza paramagnetica elettronica (EPR) nelle sue diverse varianti, presentando al contempo esempi applicativi in sistemi di interesse chimico, fisico, biologico e della scienza dei materiali: Il corso è suddiviso in due moduli, che verranno svolti a Settembre 2014 e Settembre 2015. Ogni modulo può essere svolto indipendentemente dall'altro, ma - se si intende seguire il secondo modulo, relativo alle tecniche impulsate - è consigliato seguire anche il primo, dedicato ad aspetti più generali.

Il contenuto del corso sarà il seguente:

*1^ modulo (settembre 2014)*

*2^ modulo (settembre 2015)*

Introduzione alla spettroscopia EPR pulsata. La matrice densità. La magnetizzazione nelle sequenze di impulsi: echi di spin; Spettroscopia ENDOR, ESEEM, HYSCORE e ELDOR-detected NMR per misurare interazioni iperfini. Determinazioni strutturali attraverso l'uso dell'EPR pulsata e spin labels.

**Periodo:** Settembre

**Numero minimo di studenti per l'attivazione:** 3

**Metodo di valutazione:** *esame orale o lettura critica e discussione di un articolo scientifico inerente argomenti trattati nel corso.*

**Chim. Industriale - CHIM04**

1

**Prof. A. Salvini** [antonella.salvini@unifi.it](mailto:antonella.salvini@unifi.it)

## DESIGN AND SYNTHESIS OF NEW CONSOLIDANTS FOR THEIR USE IN WOOD CONSERVATION

**Course description:** In the past, several compounds and methods have been studied and used for the treatment of waterlogged wood. PEG (polyethylene glycol), at different molecular weights, is still today the most used compound for wood consolidation. However several problems appear consequent to the presence of PEG into wood, so the study of different consolidants is required.

In the wood lifetime various agents alter the chemical structure of its main components. In detail, water and biological agents can favour hydrolysis reactions which cause the prevalent loss of hemicelluloses and cellulose, which represent the backbone of the ligneous structure. An important goal is the synthesis and characterization of some novel wood consolidants provided with a chemical structure similar to the wood, in order not to alter its aesthetic, mechanical and physical characteristics.

### Progettazione e sintesi di nuovi consolidanti per il loro uso nella conservazione del legno archeologico imbibito

**Descrizione del corso:** In passato sono stati studiati diversi metodi e prodotti per il trattamento di legni archeologici imbibiti. Tra diversi consolidanti studiati i PEG (polietilenglicol), a diversi pesi molecolari, sono ancora oggi i prodotti più utilizzati nella conservazione del legno. Tuttavia sono numerosi i problemi che sono stati evidenziati negli ultimi anni imputabili alla presenza del PEG nel legno consolidato. Risulta quindi di grande importanza lo studio di nuovi prodotti dotati di maggiore affinità per il legno e capaci di rispettarne le caratteristiche chimico-fisiche.

Nella vita di un manufatto ligneo vari agenti possono agire sui componenti principali del materiale legno modificandone la struttura chimica. In dettaglio, l'acqua e microorganismi possono favorire reazioni di idrolisi e causare la perdita di alcuni dei componenti principali come emicellulose e cellulosa. Obiettivo importante è la progettazione e la sintesi di nuovi consolidanti, caratterizzati da una struttura chimica affine ai componenti principali del legno, in modo da non

alterare l'aspetto estetico, le proprietà fisiche e quelle meccaniche.

**Periodo:** Settembre

**Numero minimo di studenti per l'attivazione:** 3

**Metodo di valutazione:** *Esame orale o lettura critica e discussione di un articolo scientifico inerente argomenti trattati nel corso.*

## Chim. Organica CHIM06

1

**Prof. ANNA BERNARDI** [anna.bernardi@unimi.it](mailto:anna.bernardi@unimi.it)  
**Dipartimento di Chim. Organica ed Industriale - Università di Milano**

### **Medicinal chemistry with carbohydrates: the influenza virus and the discovery of sialidase inhibitors**

**Course description:** 1. Introduction: the influenza virus; 2. Antiviral targets (HA, NA); 3. The viral sialidase (NA); 4. Design of sialidase inhibitors; 5. Synthesis of Tamiflu

Influenza virus is composed of a single-stranded RNA genome, enclosed within an outer lipoprotein envelope. The virions are studded with two different types of spikes, the hemagglutinin (HA) which mediates viral entry in the host cells, and the neuraminidase (sialidase, N) which assists the release of viral progeny from the infected cells. Both of these surface glycoproteins are carbohydrate-recognizing proteins and play an essential role in the lifecycle of the virus within the host organism. Considerable effort has been devoted to the discovery of novel therapeutic agents against all types of influenza by targeting HA or N, and several reviews have been published.

To date, the most successful drugs have arisen from targeting the sialidase function. Two influenza drugs, Zanamivir **1** (Relenza) and Oseltamivir **2** (Tamiflu), have emerged from structure-based drug discovery programs, which have provided one of the earliest examples of the application of structure-based drug design.

The importance of these drugs has stimulated much interesting synthetic work that will be exemplified during the first 4 h of the course. In the following 4 h, participating students will give short presentations based on papers assigned during the first part of the course.

1. Introduzione: il virus dell'influenza; 2 Targets antivirali (HA, NA); 3. La sialidasi virale (NA); 4. Design di inibitori della sialidasi; 5. Sintesi del Tamiflu

Il virus dell' influenza è composto di un genoma basato su un RNA single-stranded, racchiuso in un involucro di lipoproteine. I virioni sono decorati con due differenti tipi di "arpioni", l'emoagglutinina (HA) che media l'ingresso del virus della cellula ospite, e la neuraminidasi (sialidase, N) che assiste il rilascio del progene virale dalle cellule infettate. Ambedue queste glicoproteine di superficie sono protein che riconoscono carboidrate e giocano un ruolo essenziale nel ciclo di vita del virus all'interno dell'organismo ospitante. Notevoli sforzi sono stati dedicati alla scoperta di nuovi agenti terapeutici contro tutti i tipi di influenza focalizzandosi su HA or N, e varie reviews sono state pubblicate. Ad oggi, i farmaci più efficaci sono stati ottenuti nel caso sialidasi. Due farmaci antiinfluenzali, Zanamivir **1** (Relenza) e Oseltamivir **2** (Tamiflu), sono emersi da *structure-based* programmi di drug discovery, che hanno fornito uno dei primi esempi di applicazione di *structure-based* drug design.

L'importanza di questi farmaci ha stimolato una gran parte di interessante lavoro sintetico che sarà discusso durante il corso (4 ore) del corso. Nella seconda parte del corso gli studenti partecipanti faranno delle brevi presentazioni su lavori assegnati nel corso della prima parte.

**Periodo:** Settembre

**Numero minimo di studenti per l'attivazione:** 10

**Metodo di valutazione:** Discussione su un problema assegnato inerente argomenti trattati nel

corso (con la Dr. Gianna Reginato)