

Programma di “**Progettazione Molecolare e Chimica Inorganica Supramolecolare**” (6 CFU)
Corso di Laurea Magistrale in “**Scienze Chimiche**”
Curriculum **Chimica Organica e Bioorganica**
a.a. 2019/2020
Prof. Cosimo G. Fortuna/Prof. Roberto Purrello

Teoria (6 CFU)

- Rappresentazione molecolare (grafi, fingerprint, MIF) e minimizzazione molecolare.
- Descrittori molecolari avanzate. QSAR e 3D-QSAR.
- Descrittori molecolari circolari: il metodo Moka.
- Descrittori molecolari 3D: il metodo VolSurf.
- Applicazioni del metodo VolSurf nel campo dell'ADME
- Metodi di calcolo di bitstrings e fingerprints. Metodi di calcolo similarità molecolare.
- Il metodo Flap per il calcolo della similarità molecolare.
- Il metodo Flap per il calcolo dell'affinità con macromolecole.
- Metodi computazionali per la predizione del metabolismo. Il metodo MetaSite.
- Esercitazioni al computer.
- ***Introduzione alla chimica supramolecolare: i presupposti della sintesi non covalente***

La natura come modello: impariamo a leggere le informazioni molecolari e supramolecolari (DNA, proteine). Relazioni tra strutture (primarie, secondarie, terziarie) e funzione. Effetto allosterico. Gerarchia dell'autoassemblaggio ed inerzia cinetica: termodinamica e cinetica al lavoro

Natura delle interazioni non covalenti. Il ruolo del solvente: solubilità e solvofobicità.

Classificazione dei composti supramolecolari sintetici. Effetto chelante ed effetto macrociclo.

Preorganizzazione e complementarità.

- ***La sintesi non covalente e la sintesi covalente: un matrimonio di convenienza***
- *Chimica host-guest*
Recettori di anioni. Recettori di cationi. Recettori di molecole neutre.
- *Autoassemblaggio*

Architetture supramolecolari, cenni di crystal engineering.

Stereochimica supramolecolare. Chiralità intrinseca e chiralità indotta.

- ***La supramolecolare al lavoro: le Nanotecnologie.***

- Sensori

Elettrodi ione selettivi (ISE), membrane ionoselettive, cromoionofori, sensori piezoelettrici e di fluorescenza, naso elettronico

- Interruttori supramolecolari.

Interruttori ottici e chirottici.

Logic gates (YES, NOT, AND, OR, XOR) da sistemi supramolecolari.

- ***Applicazioni future: nanomacchine***

Strategie "top-down" e "bottom-up" per la costruzione di nanostrutture.

Le macchine molecolari nel mondo biologico. Macchine molecolari artificiali.

- Testi di riferimento:

- J.-M. Lehn, Supramolecular Chemistry, VCH
- J. W. Steed and J. L. Atwood, Supramolecular Chemistry, Wiley
- P. D. Beer, P. A. Gale and D. K. Smith Supramolecular Chemistry, OCP
- Materiale didattico ed articoli scientifici forniti dal docente