

Programma di “**Metodi per lo studio di sistemi bioinorganici**” (6 CFU)
Corso di Laurea Magistrale in “**Scienze Chimiche**”
Curriculum **Chimica Biomolecolare**
a.a. 2019/2020
Prof. Graziella Vecchio

Teoria (6 CFU)

Introduzione ai metodi per lo studio dei sistemi bioinorganici.

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

Spettroscopia NMR.

Le basi fisiche. 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.

Aspetti sperimentali. Impulso di eccitazione. Registrazione della FID. Quadrature detection. Funzioni finestra.

Esperimenti di doppia risonanza. Effetto NOE. Disaccoppiamento. Eteronuclei. 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. DOSY. Studio di sistemi contenenti ioni metallici. MRI. Principi e agenti di contrasto.

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

Testi consigliati

Horst Friebolin Basic One and Two-Dimensional NMR Spettroscopy Wiley-VCH

Alison Rodger, Bengt Nordén, Circular Dichroism and Linear Dichroism, Oxford chemistry