

<b>FACOLTÀ</b>	Farmacia
<b>ANNO ACCADEMICO</b>	2012/2013
<b>CORSO DI LAUREA MAGISTRALE A CICLO UNICO</b>	Chimica e Tecnologia Farmaceutiche
<b>INSEGNAMENTO</b>	Metodi Fisici in Chimica Organica
<b>TIPO DI ATTIVITÀ</b>	Affine
<b>AMBITO DISCIPLINARE</b>	Formazione interdisciplinare
<b>CODICE INSEGNAMENTO</b>	05070
<b>ARTICOLAZIONE IN MODULI</b>	NO
<b>NUMERO MODULI</b>	
<b>SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI</b>	CHIM/06
<b>DOCENTE RESPONSABILE</b>	Leopoldo Ceraulo Professore Ordinario Università di Palermo
<b>CFU</b>	8
<b>NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE</b>	140
<b>NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE</b>	60
<b>PROPEDEUTICITÀ</b>	Chimica Organica
<b>ANNO DI CORSO</b>	II
<b>SEDE DI SVOLGIMENTO DELLE LEZIONI</b>	Facoltà di Farmacia
<b>ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA</b>	Lezioni frontali, Esercitazioni in aula
<b>MODALITÀ DI FREQUENZA</b>	Facoltativa
<b>METODI DI VALUTAZIONE</b>	Prova Orale
<b>TIPO DI VALUTAZIONE</b>	Voto in trentesimi
<b>PERIODO DELLE LEZIONI</b>	secondo semestre
<b>CALENDARIO DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE</b>	<a href="http://portale.unipa.it/Farmacia/home/corsi_di_laurea/">http://portale.unipa.it/Farmacia/home/corsi_di_laurea/</a>
<b>ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI</b>	gio 14.30-16.30

<p><b>RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI</b></p> <p><b>Conoscenza e capacità di comprensione</b> Acquisizione degli strumenti avanzati per lo sviluppo di studi volti alla determinazione strutturale di composti organici. Capacità di utilizzare il linguaggio specifico della disciplina.</p> <p><b>Capacità di applicare conoscenza e comprensione</b> Capacità di riconoscere, ed applicare autonomamente, le metodologie necessarie per la determinazione strutturale di composti organici.</p> <p><b>Autonomia di giudizio</b> Essere in grado di valutare i risultati di studi spettroscopici volti a chiarire le caratteristiche strutturali di composti organici.</p> <p><b>Abilità comunicative</b> Capacità di esporre i risultati degli studi anche ad un pubblico non esperto. Essere in grado di sostenere l'importanza ed evidenziare le ricadute in ambito chimico e chimico-farmaceutico degli studi spettroscopici.</p> <p><b>Capacità d'apprendimento</b> Capacità di aggiornamento con la consultazione delle pubblicazioni scientifiche proprie del settore dei metodi fisici in chimica organica. Capacità di seguire, utilizzando le conoscenze acquisite nel corso, sia</p>
---

master di secondo livello, sia corsi d'approfondimento sia seminari specialistici nel settore dello studio strutturale di composti organici.

#### **OBIETTIVI FORMATIVI DEL CORSO**

L'obiettivo formativo previsto è fare acquisire allo studente le competenze necessarie sui principali metodi fisici utilizzati per la caratterizzazione strutturale di composti organici ed in particolare:

- una conoscenza approfondita dei principi fisici delle tecniche spettroscopiche;
- un metodo per l'analisi dei dati per determinare la struttura di composti organici
- una formazione utile per affrontare gli studi successivi e la futura attività professionale.

<b>CORSO</b>	<b>METODI FISICI IN CHIMICA ORGANICA</b>
<b>ORE FRONTALI</b>	<b>LEZIONI FRONTALI</b>
1	Obiettivi della disciplina e sua organizzazione
2	Interazione energia radiante-materia Lo spettro elettromagnetico, fenomeni di assorbimento e di emissione, stato eccitato e stato fondamentale. Spettroscopia di emissione e di assorbimento. Legge di Lambert-Beer-Bourguer. Assorbanza e trasmittanza.
3	Spettrofotometria ultravioletto-visibile (UV-VIS) Orbitali molecolari, orbitali leganti, non leganti e antileganti. Transizioni elettroniche. Livelli elettronici, vibrazionali e rotazionali. Transizioni permesse e transizioni proibite. Coefficiente di estinzione molare e specifico. Lo spettro UV-VIS. Solventi. Gruppi cromofori e gruppi auxocromi. Cromofori isolanti, cromofori coniugati, cromofori aromatici. Effetti del solvente, della conformazione e della geometria sulla lunghezza d'onda e sull'intensità di assorbimento. Informazioni strutturali ricavabili dall'analisi degli spettri. Regole di Woodward-Fieser (dieni), di Fieser-Kuhn (polieni), di Woodward (enoni). di additività nei composti aromatici. Realizzabilità delle misure, errori e sensibilità, deviazioni dalla legge di Lambert-Beer.
1	Fluorimetria (cenni) Decadimento di una molecola dallo stato eccitato allo stato fondamentale. Molteplicità degli stati di spin elettronico: stato singoletto, stato doppietto e stato tripletto. Vita media degli stati eccitati. Decadimenti non radioattivi: rilassamento vibrazionale e rilassamento vibronico, transizione stato tripletto-stato singoletto. Decadimenti radioattivi: luminescenza, fluorescenza e fosforescenza.
6	Spettrofotometria infrarossa (IR) Livelli rotazionali e vibrazionali. Transizioni armoniche ed anarmoniche. Previsioni delle transizioni fondamentali dai gradi di libertà. Transizioni permesse e transizioni proibite. Vibrazioni stretching e vibrazioni bending. Sovratoni, risonanza di Fermi. Assorbimenti caratteristici dei principali gruppi funzionali. Analisi degli spettri IR e informazioni strutturali. Spettrofotometri IR e metodi di esecuzione degli spettri. Spettroscopia Raman (cenni)
14	Spettrometria di massa (MS) Lo spettrometro di massa. Analizzatori di ioni (magneti, quadrupoli, dodecapoli, tempo di volo, trappole ioniche). Settori elettrostatici: strumenti a singolo e a doppio fuoco. Sorgenti ioniche e processi di ionizzazione: impatto elettronico (EI), ionizzazione e disassorbimento di campo (FI, FD), ionizzazione chimica (CI), scambio di carica (CS), fotoionizzazione (PI), ionizzazione per collisione con atomi veloci (FAB) o con ioni primari (L-SIMS), ionizzazione per desorbimento indotta dalla radiazione laser assistita da matrice (MALDI), ionizzazioni chimiche a pressione atmosferica (APCI), elettro-nebulizzazione (ESI) Ioni positivi e ioni negativi Lo spettro di massa: scala delle masse e delle intensità. Determinazione del peso molecolare e della composizione: picchi isotopici e misure di massa accurata ad alta risoluzione. Processi di frammentazione, ioni stabili, instabili e metastabili. La Quasi Equilibrium Theory (QET), regola di Stevenson. Rotture sigma, alfa e induttive, processi di rottura di un legame e processi di trasposizione, reazioni di isomerizzazione, meccanismi di frammentazione. Reazioni di rottura semplice e di trasposizione delle principali classi di composti organici. Informazioni strutturali ricavabili dagli spettri di

	massa.
2	Spettroscopia di risonanza magnetica nucleare (NMR) Momento magnetico nucleare e numero quantico di spin nucleare. Costante magnetogirica e condizione di risonanza. Principali caratteristiche strumentali di uno spettrometro di risonanza magnetica nucleare.
10	Risonanza magnetica nucleare del protone ( $^1\text{H}$ NMR) <i>Chemical shift</i> , riferimento, scala dello spettro, proporzionalità tra area del picco e numero di protoni. Effetti schermanti ed effetti deschermanti, anisotropia diamagnetica. Relazione tra i valori di <i>chemical shift</i> e intorno chimico dei protoni. Influenza della temperatura, della concentrazione e del solvente sui valori dei <i>chemical shifts</i> . Accoppiamento spin-spin: costante di accoppiamento ( $J$ ). Sistemi a due protoni ed una costante di accoppiamento ( $A_nX_m$ e $A_nB_m$ ). Correlazione tra valori di $J$ e struttura. Accoppiamento con nuclei diversi dall'idrogeno. Sistemi di accoppiamento a tre protoni con due $J$ ( $AMX$ , $ABX$ e $ABC$ ). Sistemi $AMX$ , $ABX$ e $ABC$ con tre $J$ . Accoppiamenti <i>long-range</i> . Sistemi benzenici: accoppiamenti orto, meta e para; sistemi $AA'XX'$ e $AA'BB'$ . Accoppiamento virtuale. Protoni Diasteromerici. Esperimenti con <i>reagenti di shift</i> . Esperimenti di doppia risonanza. Effetto Overhauser. Indagini strutturali attraverso l'analisi di spettri $^1\text{H}$ NMR.
5	Risonanza magnetica nucleare del $^{13}\text{C}$ ( $^{13}\text{C}$ NMR) Accumulo dei segnali, trasformata di Fourier. Tempi di rilassamento. Scala dello spettro $^{13}\text{C}$ NMR e <i>chemical shifts</i> . Accoppiamenti spin-spin $^1\text{H}$ e $^{13}\text{C}$ attraverso 1,2,3 e 4 legami. Costanti di accoppiamento. Spettri eseguiti in condizioni di disaccoppiamento totale dal protone e in condizioni di <i>off resonance</i> . Additività degli effetti dei sostituenti sul <i>chemical shift</i> dei carboni alifatici e aromatici. Indagini strutturali attraverso l'analisi di spettri $^{13}\text{C}$ NMR.
1	Risonanza magnetica nucleare bidimensionale (2D NMR) Spettroscopie: COSY, HETCOR, INEQUATE, NOESY
<b>ESERCITAZIONI IN AULA</b>	
15	Determinazione di strutture di composti organici attraverso l'analisi dei dati relativi alle tecniche studiate.
<b>TESTI CONSIGLIATI</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Silverstein &amp; Webster. Identificazione spettroscopica di composti organici, Casa Editrice Ambrosiana (C.E.A.), Milano</li> <li>• Guida al Corso di Metodi Fisici in Chimica Organica. CUSL-Milano, Voll. I,II, III.</li> <li>• Pavia, Lampman, Kriz. Introduction to Spectroscopy: a Guide for Student of Organic Chemistry. Saunders College, Philadelphia.</li> <li>• Hesse, Meier, Zeeh: Metodi Spettroscopici nella Chimica Organica, EdiSES, Napoli</li> <li>• Williams and Fleming, Spectroscopic methods in organic chemistry, 5<sup>th</sup> edition, McGraw-Hill, London</li> </ul>