

SCUOLA	delle Scienze di Base e Applicate
ANNO ACCADEMICO	2014/2015
CORSO DI LAUREA MAGISTRALE A CICLO UNICO	Chimica e Tecnologia Farmaceutiche - 2013
INSEGNAMENTO	Metodi Fisici in Chimica Organica
TIPO DI ATTIVITÀ	Affine
AMBITO DISCIPLINARE	Formazione interdisciplinare
CODICE INSEGNAMENTO	05070
ARTICOLAZIONE IN MODULI	NO
NUMERO MODULI	
SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI	CHIM/06
DOCENTE RESPONSABILE	Leopoldo Ceraulo Professore Ordinario Università di Palermo
CFU	8
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	140
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE	60
PROPEDEUTICITÀ	Chimica Organica
ANNO DI CORSO	II
SEDE DI SVOLGIMENTO DELLE LEZIONI	Dipartimento di STEBICEF
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali, Esercitazioni in aula
MODALITÀ DI FREQUENZA	Facoltativa
METODI DI VALUTAZIONE	Prova Orale
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
PERIODO DELLE LEZIONI	secondo semestre
CALENDARIO DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE	http://offweb.unipa.it/
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	Mercoledì 14,00-15,00 Giovedì 14,00-15,00 O per appuntamento tramite e-mail <leopoldo.ceraulo@unipa.it>

RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Conoscenza e capacità di comprensione

Acquisizione degli strumenti avanzati per lo sviluppo di studi volti alla determinazione strutturale di composti organici. Capacità di utilizzare il linguaggio specifico della disciplina.

Capacità di applicare conoscenza e comprensione

Capacità di riconoscere, ed applicare autonomamente, le metodologie necessarie per la determinazione strutturale di composti organici.

Autonomia di giudizio

Essere in grado di valutare i risultati di studi spettroscopici volti a chiarire le caratteristiche strutturali di composti organici.

Abilità comunicative

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.

Capacità d'apprendimento

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 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.

CORSO	METODI FISICI IN CHIMICA ORGANICA
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
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 a chimica a pressione atmosferica (APCI), elettronebulizzazione (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 (^1H NMR) <i>Chemical shift</i> , riferimento, scala dello spettro, proporzionalità tra area del picco e numero di protoni. Effetti schermanti ed effetti deschermenti, 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 ^1H NMR.
5	Risonanza magnetica nucleare del ^{13}C (^{13}C NMR) Accumulo dei segnali, trasformata di Fourier. Tempi di rilassamento. Scala dello spettro ^{13}C NMR e <i>chemical shifts</i> . Accoppiamenti spin-spin ^1H e ^{13}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}C NMR.
1	Risonanza magnetica nucleare bidimensionale (2D NMR) Spettroscopie: COSY, HETCOR, INEQUATE, NOESY
	ESERCITAZIONI IN AULA
15	Determinazione di strutture di composti organici attraverso l'analisi dei dati relativi alle tecniche studiate.
TESTI CONSIGLIATI	<ul style="list-style-type: none"> • Silverstein & Webster. Identificazione spettroscopica di composti organici, Casa Editrice Ambrosiana (C.E.A.), Milano • Guida al Corso di Metodi Fisici in Chimica Organica. CUSL-Milano, Voll. I,II, III. • Pavia, Lampman, Kriz. Introduction to Spectroscopy: a Guide for Student of Organic Chemistry. Saunders College, Philadelphia . • Hesse, Meier, Zeeh: Metodi Spettroscopici nella Chimica Organica, EdiSES, Napoli • Williams and Fleming, Spectroscopic methods in organic chemistry, 5th edition, McGraw-Hill, London