

<b>FACOLTÀ</b>	Scienze MM.FF.NN.
<b>ANNO ACCADEMICO</b>	2013/2014
<b>CORSO DI LAUREA MAGISTRALE</b>	Chimica
<b>INSEGNAMENTO</b>	Chimica Supramolecolare con Applicazioni Spettroscopiche
<b>TIPO DI ATTIVITÀ</b>	Caratterizzante
<b>AMBITO DISCIPLINARE</b>	Discipline chimiche organiche
<b>CODICE INSEGNAMENTO</b>	16493
<b>ARTICOLAZIONE IN MODULI</b>	SI
<b>NUMERO MODULI</b>	2
<b>SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI</b>	CHIM/06
<b>DOCENTE RESPONSABILE (MODULO 1)</b>	Renato Noto Professore Ordinario Università di Palermo
<b>DOCENTE COINVOLTO (MODULO 2)</b>	Paolo Lo Meo Professore Associato Università di Palermo
<b>CFU</b>	6 (mod 1) + 6 (mod 2)
<b>NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE</b>	197
<b>NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE</b>	48 (mod 1) 55 (mod 2)
<b>PROPEDEUTICITÀ</b>	Nessuna
<b>ANNO DI CORSO</b>	I
<b>SEDE DI SVOLGIMENTO DELLE LEZIONI</b>	Aula E (Ed. 17 – Piano I)
<b>ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA</b>	Lezioni frontali, Esercitazioni in laboratorio
<b>MODALITÀ DI FREQUENZA</b>	Obbligatoria
<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>	Secondo il calendario approvato dal CISC
<b>ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI</b>	Prof. R. Noto – Da lunedì a venerdì 12.00-13.00 Prof. P. Lo Meo - Da lunedì a venerdì 11.00-12.00

#### **RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI**

##### **Conoscenza e capacità di comprensione**

Acquisizione degli strumenti per la redazione di uno studio relativo alle interazioni intermolecolari. Capacità di utilizzare il linguaggio specifico proprio di questa disciplina.

##### **Capacità di applicare conoscenza e comprensione**

Capacità di riconoscere, e organizzare, in autonomia, i principi generali della disciplina nella discussione e interpretazione di dati riguardanti strutture supramolecolari.

Capacità di applicare metodologie spettroscopiche e strumentali nell'approccio a problematiche inerenti i diversi settori della chimica organica.

##### **Autonomia di giudizio**

Essere in grado di valutare quando sono possibili interazioni deboli fra le molecole e ricondurre, a

seconda dei casi, risultati sperimentali ai principi di base della disciplina .

**Abilità comunicative**

Capacità di esporre, anche a un pubblico non esperto, i risultati degli studi di differenti sistemi organizzati e ricondurli ai principi base della disciplina.

**Capacità d'apprendimento**

Capacità di aggiornamento e ampliamento delle conoscenze sulla disciplina attraverso la consultazione delle pubblicazioni scientifiche proprie del settore.

**OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO**

Riportati nel Regolamento Didattico del Corso di Studio

<b>MODULO 1</b>	<b>CHIMICA SUPRAMOLECOLARE</b>
<b>ORE FRONTALI</b>	<b>LEZIONI FRONTALI</b>
1	Breve Storia delle tappe della Chimica Supramolecolare
3	Clatrati e Cavitati
6	Forze intramolecolari, Selettività, Effetto chelante, Effetto macrociclo, preorganizzazione e complementarità.
10	Eteri corona: generalità sulla sintesi, nomenclatura, struttura, proprietà complessanti. Calixareni: generalità sulla sintesi, nomenclatura, equilibri conformazionali, capacità complessanti. Lariat eteri, Podandi, Sferandi.
4	Recettori per anioni. Confronto fra il riconoscimento dei cationi e degli anioni. I katapinandi, recettori tetraedrici, recettori lineari.
5	Recettori per molecole neutre. Ciclodestrine: funzionalizzazione, proprietà complessanti.
5	Zeoliti, clatrati e clatrati idrati.
10	Liquidi ionici: nomenclatura, struttura, proprietà, effetti catalitici. Cristalli liquidi. Gel, caratteristiche, struttura e proprietà.
4	Nanochimica, macchine molecolari, nanotubi, fullereni.
<b>TESTI CONSIGLIATI</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>- J. W. Steed, J. L. Atwood "Supramolecular Chemistry" Wiley.</li><li>- Fotocopie di articoli e/o review fornite dal docente.</li></ul>

**OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO**

Il corso di **Metodi Spettroscopici in Chimica Organica** si prefigge di sviluppare e completare le conoscenze sull'uso delle metodologie fisiche di indagine strutturale, di separazione e di analisi in chimica organica già acquisite dagli studenti nei precedenti insegnamenti.

<b>MODULO</b>	<b>METODI SPETTROSCOPICI IN CHIMICA ORGANICA E SUPRAMOLECOLARE</b>
<b>ORE FRONTALI</b>	<b>LEZIONI FRONTALI</b>
2	<b>Richiami generali di spettroscopia organica:</b> Concetti fondamentali di spettroscopia UV, IR e NMR.
5	<b>Metodologie avanzate di spettrometria di massa:</b> richiami alla teoria classica degli spettri di massa; cenni alla <i>Quasi-Equilibrium Theory</i> e sue

	conseguenze; metodi di ionizzazione in MS: IE, CI, ESI, tecniche di desorbimento, MALDI
3	Analizzatori e trappole ioniche: analizzatori a settore magnetico ed elettrostatico, analizzatori quadrupolari, QUISTOR, TOF, analizzatori in FT; problemi inerenti la focalizzazione del fascio ionico e la risoluzione spettrale; tecniche MS-MS.
3	Applicazione della spettroscopia di massa all'indagine di molecole di interesse biologico (proteine, acidi nucleici, grassi, acidi biliari).
2	<b>Aspetti teorici della Spettroscopia di risonanza magnetica</b> richiami alla teoria dello <i>spin</i> nucleare e dell'elettrone e dell'interazione tra particelle ed onde elettromagnetiche. Eccitazione di nuclei con $\text{spin } \frac{1}{2}$ , Rilassamento, Chemical shift, Molteplicità, Costanti di accoppiamento, Legge di Karplus. Equivalenza di spostamento chimico, Equivalenza magnetica.
4	<b>Spettroscopia ESR:</b> accoppiamento elettrone-nucleo e struttura iperfine degli spettri ESR; teoria delle costanti di accoppiamento iperfine; uso della spettroscopia ESR nell'indagine strutturale delle specie radicaliche; <i>spin traps</i> e loro uso.
4	<b>Teoria generale dell'NMR a impulsi:</b> definizione di vettore magnetizzazione, impulso e sue caratteristiche, FID e sua manipolazione, tempi di rilassamento e loro determinazione.
4	NMR Bidimensionale, tecniche COSY, HMQC, HMBC
2	Correlazioni $^{13}\text{C}$ - $^{13}\text{C}$ : INADEQUATE
2	TOCSY mono- e bi-dimensionale, HMQC-TOCSY, ROESY
2	NMR dinamico, NMR allo stato solido.
3	<b>Metodologie avanzate di separazione e cromatografiche:</b> teoria generale della cromatografia; equazione di van Deemter e sue conseguenze; HETP e sua valutazione; concetti di efficienza, selettività e risoluzione e loro legame.
2	<b>HPLC:</b> teoria generale dell'HPLC, strumentazione, colonne e rivelatori; <b>GC:</b> teoria generale della gas-cromatografia, strumentazione, colonne e rivelatori; Cromatografia su strato sottile e cromatografia radiale centrifuga; cenni alla cromatografia in fase supercritica.
2	<b>Tecniche elettrocromatografiche ed elettroforetiche:</b> teoria del flusso elettroforetico, elettroforesi capillare e suo uso, colonne monolitiche in CE; elettrocromatografia in pseudo-fase macellare .
	<b>ESERCITAZIONI</b>
15	Interpretazione combinata di spettri IR, MS e NMR mono- e bidimensionali
<b>TESTI CONSIGLIATI</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Silverstein et al., Identificazione spettroscopica di composti organici, CEA</li> <li>- Pedulli, Metodi fisici in chimica organica, Piccin.</li> <li>- Skoog-Leary, Chimica Analitica Strumentale, Edises.</li> <li>- dispense fornite dal docente.</li> </ul>