



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PALERMO

DIPARTIMENTO	Scienze e Tecnologie Biologiche, Chimiche e Farmaceutiche	
ANNO ACCADEMICO OFFERTA	2022/2023	
ANNO ACCADEMICO EROGAZIONE	2023/2024	
CORSO DI LAUREA MAGISTRALE A CICLO UNICO	CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE	
INSEGNAMENTO	METODI FISICI IN CHIMICA ORGANICA	
TIPO DI ATTIVITA'	C	
AMBITO	20893-Attività formative affini o integrative	
CODICE INSEGNAMENTO	05070	
SETTORI SCIENTIFICO-DISCIPLINARI	CHIM/06	
DOCENTE RESPONSABILE	FONTANA GIANFRANCO Ricercatore	Univ. di PALERMO
ALTRI DOCENTI		
CFU	8	
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	136	
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLA DIDATTICA ASSISTITA	64	
PROPEDEUTICITA'	01933 - CHIMICA ORGANICA	
MUTUAZIONI		
ANNO DI CORSO	2	
PERIODO DELLE LEZIONI	2° semestre	
MODALITA' DI FREQUENZA	Facoltativa	
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi	
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	FONTANA GIANFRANCO Martedì 14:30 16:30 viale delle scienze ed. 17. Studio docente.	

DOCENTE: Prof. GIANFRANCO FONTANA

PREREQUISITI	Conoscenza dei fondamenti di fisica e strutturistica chimica generale e organica: energia, elettromagnetismo, orbitali, livelli energetici, legami covalenti e intermolecolari, gruppi funzionali e struttura delle molecole organiche.
RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI	Conoscenza e capacita' di comprensione Acquisizione della conoscenza delle tecniche strumentali utili alla determinazione strutturale di composti organici. Capacita' di applicare conoscenza e comprensione Capacita' di effettuare una determinazione strutturale di una molecola semplice o acquisire informazioni su molecole complesse. Autonomia di giudizio Essere in grado di valutare i risultati di studi spettroscopici volti a chiarire le caratteristiche strutturali di composti organici. Abilita' comunicative. Capacita' di descrivere in modo efficace e con adeguata proprieta' di linguaggio scientifico l'analisi strutturale di una molecola o le caratteristiche delle tecniche utilizzate con le motivazioni per la loro scelta. Capacita' d'apprendimento: Capacita' di aggiornamento con la consultazione delle pubblicazioni scientifiche proprie del settore dei metodi fisici in chimica organica.
VALUTAZIONE DELL'APPRENDIMENTO	L'esame si compone di una parte scritta e una parte orale. Una prova scritta strutturata comprendente: la determinazione della struttura di una molecola semplice o di frammenti molecolari mediante analisi degli spettri: quesiti a risposta aperta o multipla e a complemento sui principi teorici delle tecniche spettroscopiche e sulle loro applicazioni. Criteri per la valutazione della prova scritta: saranno presentati un numero di quesiti compreso tra 10 e 15 a ciascuno dei quali verra' attribuito un valore compreso tra 1 e 6, normalizzato in modo che la somma totale sia pari a 30. Il punteggio attribuito a ciascun quesito sara' compreso tra 0 e il valore massimo previsto per il quesito, a seconda della correttezza e completezza della risposta. La votazione minima per poter accedere alla prova orale successiva e' pari a 15/30. La prova scritta potrà eventualmente essere suddivisa in tre sessioni parziali, due da sostenere durante il corso (prove in itinere) ed una finale nell'ambito della quale si dovranno anche applicare le conoscenze acquisite alla determinazione della struttura di una molecola. Il mancato superamento di una delle tre prove parziali potrà essere recuperato durante la prova orale. Il mancato superamento di due prove parziali comporterà la necessità di ripetere interamente l'esame. Modalita' di esecuzione e criteri di valutazione della prova orale: Se nella prova scritta si e' ottenuta una valutazione inferiore a 18/30 si deve dimostrare di possedere una conoscenza sufficiente degli argomenti del programma, altrimenti l'esame non sara' superato. In tutti gli altri casi la prova orale verte a verificare l'abilita' comunicativa del candidato con un colloquio su argomenti inerenti al programma e verranno discusse le eventuali problematicita' emerse nella prova scritta. In caso di esito positivo si attribuirà un punteggio massimo pari a 30, sulla base dei seguenti livelli di padronanza di linguaggio e contenuti: accettabile: 18 – 20; sufficiente: 21 – 23; discreto: 24-26; buono: 27-30. Il voto finale in trentesimi si ottiene dalla media delle votazioni riportate nelle due prove. Inoltre al voto finale potranno essere sommate delle valutazioni ulteriori: fino a due punti per la partecipazione a lavori di gruppo in classe e fino a due punti per la regolarità della frequenza delle lezioni.
OBIETTIVI FORMATIVI	OBIETTIVI FORMATIVI DEL CORSO Acquisizione delle competenze fondamentali 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 metodologica e competenziale utile per affrontare gli studi successivi e la futura attivita' professionale.
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali in aula.
TESTI CONSIGLIATI	Silverstein & Webster. Identificazione spettroscopica di composti organici, Casa Editrice Ambrosiana (C.E.A.), Milano, 3a edizione 2016, ISBN 9788808183507. Hesse, Meier, Zeeh: Metodi Spettroscopici nella Chimica Organica, EdiSES, Napoli. 2° edizione 2010, ISBN 9788879596626. Field, Sternhell, Kallman: Organic Structures from Spectra, V ed. Wiley. 2013,

PROGRAMMA

ORE	Lezioni
2	<p>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-BeerBourguer. Assorbanza e trasmittanza.</p>
4	<p>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.</p>
1	<p>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 radiativi: rilassamento vibrazionale e rilassamento vibronico, transizione stato tripletto-stato singoletto . Decadimenti radiativi: luminescenza, fluorescenza e fosforescenza.</p>
6	<p>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).</p>
14	<p>Spettrometria di massa (MS) Lo spettrometro di massa. Analizzatori di ioni (magneti, quadrupoli, tempo di volo, trappole ioniche). Sorgenti ioniche e processi di ionizzazione: impatto elettronico (EI), ionizzazione e disassorbimento di campo (FI, FD), ionizzazione chimica (CI), fotoionizzazione (PI), ionizzazione per collisione con atomi veloci (FAB), ionizzazione per desorbimento indotto la radiazione laser assistita da matrice (MALDI), ionizzazioni a chimica a pressione atmosferica (APCI), elettrobulizzazione (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). 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.</p>
2	<p>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.</p>
10	<p>Risonanza magnetica nucleare del protone (1HNMR) Chemical shift, riferimento, scala dello spettro, proporzionalità tra area del picco e numero di protoni. Effetti schermanti ed effetti deschermani, anisotropia diamagnetica. Relazione tra i valori di chemical shift e intorno chimico dei protoni. Influenza della temperatura, della concentrazione e del solvente sui valori dei chemical shifts. Fattori da cui dipende la larghezza del picco NMR; tempi di rilassamento trasversale e longitudinale. Fenomeni di scambio protonico e tempi di rilassamento; NMR dinamico. Accoppiamento spin-spin: costante di accoppiamento (j). Sistemi a due protoni ed una costante di accoppiamento (AnXm e AnBm). 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 longrange. Sistemi benzenici: accoppiamenti orto, meta e para; sistemi AA'XX' e AA'BB'. Accoppiamento virtuale. Protoni Diasteromerici. Esperimenti con reagenti di shift. Esperimenti di doppia risonanza. Effetto Overhauser. Indagini strutturali attraverso l'analisi di spettri 1HNMR.</p>
6	<p>Risonanza magnetica nucleare del 13 C (13C NMR) Accumulo dei segnali, trasformata di Fourier. Tempi di rilassamento. Scala dello spettro 13C NMR e chemical shifts . Accoppiamenti spin-spin 1H e 13C attraverso 1,2,3 e 4 legami. Costanti di accoppiamento. Spettri eseguiti in condizioni di disaccoppiamento totale dal protone e in condizioni di off resonance . Additività degli effetti dei sostituenti sul chemical shift dei carboni alifatici e aromatici. Indagini strutturali attraverso l'analisi di spettri 13C NMR .</p>
4	<p>Risonanza magnetica nucleare bidimensionale (2D NMR) Spettroscopie: COSY, HETCOR, INEQUATE, NOESY</p>

PROGRAMMA

ORE	Lezioni
15	illustrazione di spettri di molecole semplici e complesse