



# UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PALERMO

<b>DIPARTIMENTO</b>	Scienze e Tecnologie Biologiche, Chimiche e Farmaceutiche	
<b>ANNO ACCADEMICO OFFERTA</b>	2018/2019	
<b>ANNO ACCADEMICO EROGAZIONE</b>	2019/2020	
<b>CORSO DILAUREA MAGISTRALE A CICLO UNICO</b>	CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE	
<b>INSEGNAMENTO</b>	METODI FISICI IN CHIMICA ORGANICA	
<b>TIPO DI ATTIVITA'</b>	C	
<b>AMBITO</b>	20893-Attività formative affini o integrative	
<b>CODICE INSEGNAMENTO</b>	05070	
<b>SETTORI SCIENTIFICO-DISCIPLINARI</b>	CHIM/06	
<b>DOCENTE RESPONSABILE</b>	FONTANA GIANFRANCO Ricercatore	Univ. di PALERMO
<b>ALTRI DOCENTI</b>		
<b>CFU</b>	8	
<b>NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE</b>	136	
<b>NUMERO DI ORE RISERVATE ALLA DIDATTICA ASSISTITA</b>	64	
<b>PROPEDEUTICITA'</b>	01933 - CHIMICA ORGANICA	
<b>MUTUAZIONI</b>		
<b>ANNO DI CORSO</b>	2	
<b>PERIODO DELLE LEZIONI</b>	2° semestre	
<b>MODALITA' DI FREQUENZA</b>	Facoltativa	
<b>TIPO DI VALUTAZIONE</b>	Voto in trentesimi	
<b>ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI</b>	<b>FONTANA GIANFRANCO</b> Martedì 14:30 16:30 viale delle scienze ed. 17. Studio docente.	

DOCENTE: Prof. GIANFRANCO FONTANA

<b>PREREQUISITI</b>	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.
<b>RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI</b>	<p>Conoscenza e capacita' di comprensione</p> <p>Acquisizione della conoscenza delle tecniche strumentali utili alla determinazione strutturale di composti organici.</p> <p>Capacita' di applicare conoscenza e comprensione</p> <p>Capacita' di effettuare una determinazione strutturale di una molecola semplice o acquisire informazioni su molecole complesse.</p> <p>Autonomia di giudizio</p> <p>Essere in grado di valutare i risultati di studi spettroscopici volti a chiarire le caratteristiche strutturali di composti organici.</p> <p>Abilita' comunicative.</p> <p>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.</p> <p>Capacita' d'apprendimento:</p> <p>Capacita' di aggiornamento con la consultazione delle pubblicazioni scientifiche proprie del settore dei metodi fisici in chimica organica.</p>
<b>VALUTAZIONE DELL'APPRENDIMENTO</b>	<p>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.</p> <p>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 2 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.</p> <p>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.</p> <p>Il voto finale in trentesimi si ottiene dalla media delle votazioni riportate nelle due prove.</p>
<b>OBIETTIVI FORMATIVI</b>	<p><b>OBIETTIVI FORMATIVI DEL CORSO</b></p> <p>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.</p>
<b>ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA</b>	Lezioni frontali in aula.
<b>TESTI CONSIGLIATI</b>	<p>Silverstein &amp; Webster. Identificazione spettroscopica di composti organici, Casa Editrice Ambrosiana (C.E.A.), Milano</p> <p>Hesse, Meier, Zeeh: Metodi Spettroscopici nella Chimica Organica, EdiSES, Napoli.</p>

### PROGRAMMA

ORE	Lezioni
2	<p>Interazione energia radiante-materia</p> <p>Lo spettro elettromagnetico, fenomeni di assorbimento e di emissione, stato eccitato e stato fondamentale. Spettroscopia di emissione e di assorbimento. Legge di Lambert-BeerBourguer.</p> <p>Assorbanza e trasmittanza.</p>

## PROGRAMMA

ORE	Lezioni
3	<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. 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.</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 radioattivi: rilassamento vibrazionale e rilassamento vibronico, transizione stato tripletto-stato singoletto . Decadimenti radioattivi : 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, 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), 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.</p>
1	<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 descheranti, 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. 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 Diastereomerici. Esperimenti con reagenti di shift. Esperimenti di doppia risonanza. Effetto Overhauser. Indagini strutturali attraverso l'analisi di spettri 1HNMR.</p>
5	<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>
18	<p>illustrazione di spettri di molecole semplici e complesse</p>