

FACOLTÀ	Scienze MM.FF.NN.
ANNO ACCADEMICO	2012/2013
CORSO DI LAUREA MAGISTRALE	Chimica
INSEGNAMENTO	Chimica Supramolecolare con Applicazioni Spettroscopiche
TIPO DI ATTIVITÀ	Caratterizzante
AMBITO DISCIPLINARE	Discipline chimiche organiche
CODICE INSEGNAMENTO	16493
ARTICOLAZIONE IN MODULI	SI
NUMERO MODULI	2
SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI	CHIM/06
DOCENTE RESPONSABILE (MODULO 1)	Renato Noto Professore Ordinario Università di Palermo
DOCENTE COINVOLTO (MODULO 2)	Paolo Lo Meo Professore Associato Università di Palermo
CFU	6 (mod 1) + 6 (mod 2)
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	197
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE	48 (mod 1) 55 (mod 2)
PROPEDEUTICITÀ	Nessuna
ANNO DI CORSO	I
SEDE DI SVOLGIMENTO DELLE LEZIONI	Aula E (Ed. 17 – Piano I)
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali, Esercitazioni in laboratorio
MODALITÀ DI FREQUENZA	Obbligatoria
METODI DI VALUTAZIONE	Prova Orale
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
PERIODO DELLE LEZIONI	Secondo semestre
CALENDARIO DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE	Dal lunedì al venerdì 08.00 -10-00 Laboratorio Mercoledì 14.00 – 18.00
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	Prof. R. Noto - Da programmare renato.noto@unipa.it Prof. P. Lo Meo - Da lunedì a venerdì 11.00-12.00 paolo.lopeo@unipa.it

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

MODULO 1	CHIMICA SUPRAMOLECOLARE
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
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.
TESTI CONSIGLIATI	<ul style="list-style-type: none"> - J. W. Steed, J. L. Atwood "Supramolecular Chemistry" Wiley. - Fotocopie di articoli e/o review fornite dal docente.

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.

MODULO	METODI SPETTROSCOPICI IN CHIMICA ORGANICA E SUPRAMOLECOLARE
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
2	Richiami generali di spettroscopia organica: Concetti fondamentali di spettroscopia UV, IR e NMR.
5	Metodologie avanzate di spettrometria di massa: 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	Aspetti teorici della Spettroscopia di risonanza magnetica 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	Spettroscopia ESR: 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	Teoria generale dell'NMR a impulsi: 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}C - ^{13}C : INADEQUATE
2	TOCSY mono- e bi-dimensionale, HMQC-TOCSY, ROESY
2	NMR dinamico, NMR allo stato solido.
3	Metodologie avanzate di separazione e cromatografiche: 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	HPLC: teoria generale dell'HPLC, strumentazione, colonne e rivelatori; GC: teoria generale della gas-cromatografia, strumentazione, colonne e rivelatori; Cromatografia su strato sottile e cromatografia radiale centrifuga; cenni alla cromatografia in fase supercritica.
2	Tecniche elettrocromatografiche ed elettroforetiche: teoria del flusso elettroforetico, elettroforesi capillare e suo uso, colonne monolitiche in CE; elettrocromatografia in pseudo-fase macellare .
	ESERCITAZIONI
15	Interpretazione combinata di spettri IR, MS e NMR mono- e bidimensionali
TESTI CONSIGLIATI	<ul style="list-style-type: none"> - Silverstein et al., Identificazione spettroscopica di composti organici, CEA - Pedulli, Metodi fisici in chimica organica, Piccin. - Skoog-Leary, Chimica Analitica Strumentale, Edises. - dispense fornite dal docente.