

SCUOLA	Scienze di Base e Applicate
ANNO ACCADEMICO	2014/2015
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	12
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	197
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE	103
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	Modulo di Chimica Supramolecolare: da lunedì a venerdì, ore 09.00-10.00 Modulo di Metodi Spettroscopici: da lunedì a venerdì, ore 08.00-09.00
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	Prof. R. Noto: da lunedì a venerdì, ore 12.00-13.00 Prof. P. Lo Meo: da lunedì a venerdì, ore 11.00-12.00

RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Conoscenza e capacità di comprensione

Conoscere le interazioni deboli che regolano i processi di riconoscimento molecolare.

Conoscere i principali recettori molecolari.

Conoscere sistemi supramolecolari derivanti da fenomeni di auto aggregazione.

Conoscere le principali tecniche spettroscopiche utili ai fini della descrizione di un fenomeno di interazione supramolecolare.

Capacità di applicare conoscenza e comprensione

Riconoscere le interazioni presenti in un particolare aggregato supramolecolare.

Riconoscere le possibili applicazioni di un aggregato supramolecolare e organizzare.

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.

Essere in grado di valutare i dati spettroscopici alla luce di possibili interazioni supramolecolari.

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

Il modulo di **Chimica Supramolecolare** ha l'obiettivo di trattare sistemi derivanti da interazioni deboli a partire da quelli più semplici costituiti da due specie (substrato-recettore) a quelli più complessi provenienti dall'aggregazione di più unità. Per quel che riguarda il recettore sarà messa in evidenza la relazione esistente tra la struttura molecolare dello stesso e la sua capacità di svolgere le funzioni di riconoscimento molecolare. Per i vari sistemi sarà discussa la loro possibile applicazione.

MODULO 1	CHIMICA SUPRAMOLECOLARE
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
1	Breve Storia delle tappe della Chimica Supramolecolare
3	Definizione di clatrati e cavitati.
6	Forze intramolecolari, Selettività, Effetto chelante, Effetto macrociclo, preorganizzazione e complementarità. Relazioni struttura-proprietà.
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.
------------------------------	--

<p>OBIETTIVI FORMATIVI DEL MODULO</p> <p>Il corso di Metodi Spettroscopici in Chimica Organica e Supramolecolare si pone lo scopo di fornire e sviluppare le necessarie conoscenze sull'uso delle moderne metodologie fisiche e spettrometriche per la risoluzione di problemi inerenti l'indagine strutturale di molecole organiche e di aggregati supramolecolari.</p>
--

MODULO	METODI SPETTROSCOPICI IN CHIMICA ORGANICA E SUPRAMOLECOLARE
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
3	Concetti generali di spettroscopia: Interazione radiazione-materia e sue conseguenze; il problema del riconoscimento strutturale in Chimica Organica e Supramolecolare; richiami di spettroscopia UV-vis.
3	Metodologie di spettrometria di massa: Spettrometria di massa "classica": ionizzazione per impatto elettronico con analizzatore magnetico e problemi relativi; cenni alla <i>Quasi-Equilibrium Theory</i> e sue conseguenze, fenomeni di frammentazione in EI-MS, <i>pattern</i> di frammentazione delle principali classi di molecole organiche; concetto di risoluzione in MS e problemi relativi.
3	Metodi di ionizzazione in MS: CI, FAB, tecniche di desorbimento, MALDI, ESI e loro applicazioni.
3	Analizzatori in MS: analizzatori elettrostatici e loro accoppiamento con l'analizzatore magnetico; analizzatori quadrupolari, trappola ionica, TOF, ICR; problemi inerenti la focalizzazione e la risoluzione spettrale.
4	Tecniche MS-MS e loro principali applicazioni; applicazioni della spettrometria di massa all'indagine di molecole di interesse biologico (proteine, acidi nucleici, grassi, acidi biliari) e di aggregati supramolecolari.
3	Spettroscopia IR: principi generali, riconoscimento dei gruppi funzionali organici tramite spettroscopia IR, fattori che influenzano le frequenze vibrazionali dei principali gruppi funzionali; cenni alla tecnica FT-IR.
2	Introduzione alla Spettroscopia di Risonanza Magnetica Nucleare: richiami alla teoria dello <i>spin</i> nucleare; eccitazione di nuclei con $spin\ \frac{1}{2}$ e concetto di <i>chemical shift</i> ; la tecnica NMR "classica" in onda continua; spettroscopia 1H -NMR: fattori strutturali da cui dipende il <i>chemical shift</i> del protone, anisotropia magnetica dei gruppi insaturi e sue conseguenze.
4	Teoria generale dell'accoppiamento di <i>spin</i>: molteplicità e struttura fine dei segnali; costanti di accoppiamento e fattori che ne influenzano il valore, Legge di Karplus; tecniche di doppia risonanza e di disaccoppiamento selettivo; effetto nucleare Overhauser (NOE) e sue applicazioni a problemi stereochimici; sistemi di <i>spin</i> complessi; equivalenza di spostamento chimico ed equivalenza magnetica in rapporto alla simmetria molecolare.
4	Teoria generale della tecnica FT-NMR: vettore magnetizzazione; concetto di impulso, sue caratteristiche e sua interazione col campione; rilassamento nucleare, FID e sua manipolazione; concetti di canale e di sequenza di impulsi; tempi di rilassamento e loro determinazione.
3	Spettroscopia ^{13}C NMR: principi generali, fattori che influenzano il <i>chemical shift</i> del ^{13}C ; disaccoppiamento 1H - ^{13}C e sue conseguenze, tecniche <i>off-resonance</i> , disaccoppiamento selettivo e disaccoppiamento selettivo inverso; trasferimento di polarizzazione e sequenza INEPT, spettri DEPT.

6	Tecniche NMR bidimensionali: omo- ed etero-correlazione, spettri COSY, HETCOR, HMQC e HMBC; correlazione ^{13}C - ^{13}C , spettri INADEQUATE; tecniche TOCSY mono- e bi-dimensionale, HMQC-TOCSY; tecniche NOESY e ROESY; applicazioni delle tecniche NMR bidimensionali allo studio di biomolecole e di aggregati supramolecolari.
2	NMR dinamico e sue applicazioni; cenni alle tecniche NMR in stato solido.
	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.