

FACOLTÀ	Scienze MM. FF. NN.
ANNO ACCADEMICO	2015-2016
CORSO DI LAUREA	Chimica
INSEGNAMENTO	Chimica Organica Fisica
TIPO DI ATTIVITÀ	Caratterizzante
AMBITO DISCIPLINARE	Discipline chimiche organiche e biochimiche
CODICE INSEGNAMENTO	13736
ARTICOLAZIONE IN MODULI	No
SETTORE SCIENTIFICO DISCIPLINARE	CHIM/06
DOCENTE RESPONSABILE	Vincenzo Frenna Prof. Ordinario Università di Palermo
CFU	6
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	102
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE	48
PROPEDEUTICITÀ	Chimica Generale ed Inorganica, Esercitazioni di preparazioni chimiche con laboratorio
ANNO DI CORSO	Terzo
SEDE DI SVOLGIMENTO DELLE LEZIONI	Aula D – Ed. 17 viale delle Scienze
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali
MODALITÀ DI FREQUENZA	Obbligatoria
METODI DI VALUTAZIONE	Prova orale
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
PERIODO DELLE LEZIONI	Primo semestre
CALENDARIO DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE	Secondo il calendario approvato dal CISC
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	Lunedì, Mercoledì e Venerdì 10.00-11.00

RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Conoscenza e capacità di comprensione

Approfondire i temi fondamentali della struttura e della reattività delle molecole organiche facendo uso anche dei necessari mezzi forniti dalla Chimica Fisica

Capacità di applicare conoscenza e comprensione

Capacità di razionalizzare le proprietà delle molecole organiche collegandole ai fenomeni che sono alla base dei meccanismi delle reazioni organiche.

Autonomia di giudizio

Capacità di razionalizzare e prevedere i possibili meccanismi delle reazioni organiche

Abilità comunicative

Capacità di utilizzare il linguaggio specifico proprio della disciplina.

Capacità d'apprendimento

Capacità di comprensione dei meccanismi di reazione e loro applicazioni in modelli chimici e biochimici.

--

OBIETTIVI FORMATIVI

Il corso di **Chimica Organica Fisica** per la laurea in **Chimica** sarà caratterizzato da un approccio descrittivo-fenomenologico. I diversi argomenti proposti, dalla struttura elettronica delle molecole organiche ai concetti basilari di Chimica Fisica, indispensabili per una moderna descrizione dei fatti della Chimica Organica, agli strumenti che il chimico organico adopera per lo studio dei meccanismi di reazione, verranno presentati come base per la comprensione dei meccanismi delle reazioni organiche

ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
6	Rappresentazione di Lewis delle strutture molecolari – Orbitali atomici e molecolari – Teoria degli orbitali molecolari – Equazioni secolari – Il metodo di Huckel – Applicazione del metodo di Huckel ad alcuni sistemi lineari, aromatici ed eteroaromatici – Idrocarburi alternanti – Il metodo del legame di valenza – Carattere aromatico.
3	Orbitali molecolari di frontiera e reattività – Equazione di Klopman – Salem – Teoria degli acidi e basi Hard e Soft
5	Le reazioni chimiche e la conservazione della simmetria degli orbitali – Diagrammi di correlazione – Reazioni pericicliche – Reazioni elettrocicliche – Cicloaddizioni – Reazioni sigmatropiche -
5	Struttura e Meccanismi – Studi cinetici – Ordine e composizione dello stato di transizione – reazioni complesse e derivazione delle espressioni cinetiche – Esempi di meccanismi .
3	Cinetica e termodinamica – L’equazione di Arrhenius – La coordinata di reazione – Energia di punto zero – Parametri di attivazione
3	Uso cinetico e non cinetico degli isotopi – Effetto isotopico cinetico – Effetto Tunnel – Uso di indicatori isotopici – Esempi – Influenza del solvente – Equazione di Winstein e Grunwald.
3	Principi fondamentali di Chimica Organica Fisica – Principio di reattività selettività – Postulato di Hammond – Ipotesi di Lefler – Principio della reversibilità microscopica – Controllo cinetico e termodinamico.
5	Analisi della coordinata di reazione – Superfici di energia potenziale – Effetto Hammond ed effetto Thornton – Diagrammi di More O’Ferral Jencks – Teoria di marcus
6	Relazioni lineari di energia libera – L’equazione di Hammett – La costante dei sostituenti – La costante di reazione – Costanti dei sostituenti modificate – L’equazione di Yukawa Tsuno – L’equazione di Hammett espansa – L’equazione di Taft – L’equazione di Fujita e Nishioka.
5	Acidi e basi di Bronsted – Forza degli acidi e delle basi – Funzioni di acidità – Catalisi acida e basica – Catalisi specifica e generale L’equazione di

	Bronsted.
4	Studio degli intermedi di reazione – Carbocationi – Carbanioni – Radicali – isolamento degli intermedi – Individuazione degli intermedi.
TESTI CONSIGLIATI	Testi consigliati T. H. Lowry, K. S. Richardson – Mechanism and Theory in Organic Chemistry – III Ediz. E. V. Anslyn, D. A. Dougherty – Modern Physical Organic Chemistry. R. Alder, R. Baker, J. M. Brown – Meccanismi di reazione della Chimica Organica. Appunti forniti dal docente.