UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PALERMO

DIPARTIMENTO	Fisica e Chimica - Emilio Segrè
ANNO ACCADEMICO OFFERTA	2020/2021
ANNO ACCADEMICO EROGAZIONE	2020/2021
CORSO DILAUREA MAGISTRALE	CHIMICA
INSEGNAMENTO	SPETTROSCOPIA ORGANICA
TIPO DI ATTIVITA'	B
AMBITO	50485-Discipline chimiche organiche
CODICE INSEGNAMENTO	19814
SETTORI SCIENTIFICO-DISCIPLINARI	CHIM/06
DOCENTE RESPONSABILE	LO MEO PAOLO MARIA GIUSEPPE Professore Associato Univ. di PALERMO
ALTRI DOCENTI	
CFU	6
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	98
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLA DIDATTICA ASSISTITA	52
PROPEDEUTICITA'	
MUTUAZIONI	
ANNO DI CORSO	1
PERIODO DELLE LEZIONI	1° semestre
MODALITA' DI FREQUENZA	Obbligatoria
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	**LO MEO PAOLO MARIA GIUSEPPE** Lunedì 15:00 17:00 Studio del docente, V.le delle Scienze Ed. 17.

DOCENTE: Prof. PAOLO MARIA GIUSEPPE LO MEO

PREREQUISITI	Conoscenze di base di Chimica Organica e Chimica Fisica, principi della meccanica quantistica, interazione onda-materia e principi di spettroscopia UV-Vis, campi elettrici e magnetici e loro interazione con particelle elettricamente cariche.
RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI	Conoscenza e capacita' di comprensione: Conoscere le principali tecniche spettroscopiche moderne utilizzate per lo studio di molecole organiche, loro aggregati e materiali organici. Capacita' di utilizzare il linguaggio specifico proprio della disciplina. Capacita' di applicare conoscenza e comprensione: Capacita' di riconoscere e organizzare in autonomia i principi generali della disciplina nella discussione e interpretazione di dati riguardanti strutture organiche (molecolari, macromolecolari e supramolecolari). Capacita' di applicare le tecniche spettroscopiche piu' comuni per risolvere problemi strutturali in chimica organica. Autonomia di giudizio: Essere in grado di prevedere ragionevolmente la risposta spettroscopica di una struttura organica. Abilita' comunicative: Capacita' di esporre, anche a un pubblico non esperto, i risultati della elucidazione spettroscopica di una struttura organica. Capacita' d'apprendimento: Capacita' di aggiornamento e ampliamento delle conoscenze sulla disciplina attraverso la consultazione delle pubblicazioni scientifiche proprie del settore.
VALUTAZIONE DELL'APPRENDIMENTO	L'esame comprende: a) una prova scritta di interpretazione di spettri di una molecola organica, durata 90 minuti; b) un colloquio orale vertente sui contenuti del corso (almeno tre domande). L'esame nel suo complesso e' teso a valutare l'acquisizione dei contenuti disciplinari del corso. Inoltre, saranno positivamente valutate la capacita' di utilizzare correttamente e disinvoltamente il linguaggio proprio della disciplina, la capacita' di cogliere collegamenti interdisciplinari con tutti gli aspetti della chimica organica moderna (ivi comprese la chimica supramolecolare e la chimica dei materiali organici), la capacita' di elaborare le informazioni relative a un sistema di studio al fine di razionalizzarne il comportamento e prevedere nuove osservazioni. Il giudizio finale complessivo e' espresso in trentesimi. La valutazione finale viene graduata prendendo in considerazione: a) Conoscenza di base dei concetti e limitata capacita' di analisi dei casi proposti (voto 18-21); b) Buona conoscenza dei concetti svolti a lezione e sufficiente capacita' di applicarli ai casi proposti nel corso dell'esame, anche se in modo non completamente autonomo (voto 22-25); c) Ottima conoscenza dei concetti e capacita' di applicarla autonomamente ai casi proposti, (voto 26-28); d) Conoscenza molto approfondita della teoria, capacita' di applicarla prontamente ai casi proposti, capacita' di stabilire collegamenti interdisciplinari (in particolare con la chimica supramolecolare e dei materiali), ottima proprieta' di espressione (voto 29-30L).
OBIETTIVI FORMATIVI	Il corso di Spettroscopia Organica 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, ivi compresi aggregati supramolecolari, biomolecole e materiali organici.
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali ed esercitazioni
TESTI CONSIGLIATI	- Silverstein et al., "Identificazione spettrometrica di composti organici", CEA (2a ed. 2006) - Hesse et al. "Metodi Spettroscopici in Chimica Organica", Edisies (2a ed. 2010) - de Hoffmann, Stroobant, "Mass Spectrometry principles and applications", WILEY (3a ed. 2007) - Friebolin, Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy, WILEY (5a ed. 2010).

PROGRAMMA

ORE	Lezioni
2	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	Spettroscopia IR: principi generali, riconoscimento dei gruppi funzionali organici tramite spettroscopia IR, fattori che influenzano le frequenze vibrazionali dei principali gruppi funzionali; tecniche interferometriche FT-IR.
4	Metodologie di spettrometria di massa: la tecnica "classica" tramite ionizzazione per impatto elettronico e analisi magnetica, e problemi relativi; cenni alla Quasi-Equilibrium Theory e sue conseguenze, fenomeni di frammentazione in EI-MS, vie di frammentazione delle principali classi di molecole organiche; concetto di risoluzione in MS e problemi relativi.
2	Altri metodi di ionizzazione in MS: CI, FAB, MALDI, ESI e loro applicazioni.

PROGRAMMA

ORE	Lezioni
2	Altri analizzatori in MS: analizzatori elettrostatici e loro accoppiamento con l'analizzatore magnetico; analizzatori quadrupolari, trappola ionica, TOF, ICR, analizzatori ibridi (Q-TOF), Orbitrap.
4	Tecniche MS-MS e loro principali applicazioni; applicazioni della spettrometria di massa all'indagine di molecole di interesse biologico (proteine, grassi) e di aggregati supramolecolari.
3	Introduzione alla Spettroscopia di Risonanza Magnetica Nucleare: richiami alla teoria dello spin nucleare; eccitazione di nuclei con spin ½ e concetto di "chemical shift"; la tecnica NMR "classica" in onda continua; spettroscopia 1H-NMR: fattori strutturali da cui dipende il chemical shift del protone, anisotropia magnetica dei gruppi insaturi e sue conseguenze.
4	Teoria generale della tecnica NMR a impulsi: 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 (sequenze "inversion-recovery" e "spin-echo").
5	Teoria generale dell'accoppiamento di spin: molteplicita' e struttura fine dei segnali; costanti di accoppiamento e fattori che ne influenzano il valore, Legge di Karplus; tecniche di doppia risonanza: disaccoppiamento selettivo e trasferimento di polarizzazione; effetto nucleare Overhauser (NOE) e sue applicazioni a problemi stereochimici; sistemi di spin complessi; equivalenza di chemical shift ed equivalenza magnetica in rapporto alla simmetria molecolare.
3	Spettroscopia 13C NMR: principi generali, fattori che influenzano il chimical shift del 13C; disaccoppiamento 1H-13C e sue conseguenze, tecniche off-resonance, disaccoppiamento controllato inverso; trasferimento di polarizzazione e sequenza INEPT, spettri DEPT.
5	Tecniche NMR bidimensionali: omo- ed etero-correlazione, spettri COSY, HETCOR, HMQC, HSQC, COLOC e HMBC; correlazione 13C-13C, 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.
3	Applicazioni particolari della spettroscopia NMR: NMR dinamico e sue applicazioni; tecniche NMR in stato solido; tecniche FFC-NMR.

ORE	Esercitazioni
12	Interpretazione combinata di spettri (IR, MS, NMR mono e bi-dimensionali) di molecole organiche e biomolecole.