



| Principali informazioni sull'insegnamento | |
|---|--|
| Denominazione dell'insegnamento | Metodi Fisici in Chimica Organica |
| Corso di studio | CTF |
| Anno di corso | III |
| Crediti formativi universitari (CFU) / European Credit Transfer and Accumulation System (ECTS): | 8 CFU |
| SSD | CHIM 06 – chimica organica |
| Lingua di erogazione | Italiano |
| Anno Accademico | 2021/2022 |
| Periodo di erogazione | Secondo semestre |
| Obbligo di frequenza | obbligatoria |

| Docente | |
|--|---|
| Nome e cognome | Renzo LUISI |
| Indirizzo mail | renzo.luisi@uniba.it |
| Telefono | 0805442762 |
| Sede | Dipartimento di Farmacia – Scienze del Farmaco |
| Sede virtuale | Contatto teams (mail istituzionale) |
| Ricevimento (giorni, orari e modalità) | Lunedì – venerdì ore 15:00 - 17:00 Previo appuntamento, ricevimento telematico |

| Syllabus | |
|--|--|
| Obiettivi formativi | Analisi delle proprietà spettroscopiche delle molecole organiche (risonanza magnetica, spettroscopia UV, Infrarossa e di massa) finalizzate all'assegnazione della loro formula di struttura. |
| Prerequisiti | Conoscenze di base di Chimica Organica e Fisica |
| Contenuti di insegnamento (Programma) | Principi generali sulle tecniche di indagine chimica strutturale. Interazione energia radiante - materia. Lo spettro elettromagnetico, fenomeni di assorbimento e di emissione, stato eccitato e stato fondamentale. Spettroscopia di emissione e di assorbimento. Spettroscopia Infrarossa (IR). Concetti teorici fondamentali. Energia e frequenza vibrazionale in molecole biatomiche e poliatomiche. Vibrazioni di stiramento e di piegamento. Classificazioni delle bande di assorbimento. Modello per l'eccitazione vibrazionale del legame. Spettrofotometro IR a doppio raggio. Spettrometro FT-IR. Preparazione dei campioni e registrazione degli spettri IR. Interpretazione degli spettri IR delle principali classi di composti organici. Spettroscopia Ultravioletta e Visibile (UV-VIS). Transizioni elettroniche e assorbimento nell'UV e visibile. Livelli energetici elettronici, vibrazionali e rotazionali. Lo spettrofotometro UV-Visibile. Preparazione dei campioni e registrazione degli spettri. Livelli energetici, orbitali molecolari e transizioni elettroniche in alcheni isolati e sostituiti con auxocromi, nel butadiene, nei polieni coniugati, nel gruppo carbonilico. Transizione $n \rightarrow \pi^*$ del gruppo carbonilico. Livelli energetici e transizioni elettroniche $\pi \rightarrow \pi^*$ e $n \rightarrow \pi^*$ nei composti carbonilici α, β insaturi. Orbitali molecolari, livelli energetici e transizioni elettroniche nel benzene. Effetti della presenza di sostituenti. Effetti del pH su composti acidi e basici. Spettri UV di composti aromatici policiclici. Spettroscopia di Risonanza Magnetica Nucleare (NMR). Proprietà magnetiche dei nuclei atomici. Transizioni di spin nucleare e loro energia. Precessione nucleare e risonanza magnetica nucleare. Popolazione dei livelli energetici. Spettrometro FT- |



| | |
|-------------------------------------|---|
| | <p>NMR, definizione di impulso. Sistema di riferimento fisso e sistema di riferimento ruotante. Tempi di rilassamento. Lo spostamento chimico. Shielding diamagnetico e costante di schermo. Fattori che provocano la variazione del chemical shift. Anisotropia diamagnetica. Molteplicità del segnale. Origine dello splitting. Accoppiamento geminale e vicinale.</p> <p>Accoppiamenti "long range": accoppiamenti meta e para in composti aromatici, accoppiamento allilico e omoallilico, accoppiamento virtuale, accoppiamenti a W in composti saturi. Fattori che influenzano la costante di accoppiamento. Spostamento chimico e accoppiamento di protoni legati all'ossigeno, all'azoto e allo zolfo. Equivalenza chimica e magnetica. Protoni enantiotopici e diastereotopici. Spettri di primo e di secondo ordine. Sistemi AX, AB, AMX, ABX, AA'XX' e AA'BB'.. Disaccoppiamento omonucleare. Fenomeni dinamici. Effetto della chiralità, agenti solvatanti chirali. Correlazioni empiriche per calcolare i chemical shift per gli alcani e per gli alcheni. Risonanza magnetica del ¹³C. Spettri totalmente accoppiati, completamente disaccoppiati e "off resonance". Inverse Gated decoupling e sequenze per il calcolo del T1. Effetto nucleare Overhauser. Parametri di shift additivi in idrocarburi alifatici lineari e ramificati, negli alcheni e nei composti aromatici. APT, DEPT.</p> <p>Spettrometria di Massa (MS). Concetti teorici fondamentali. Spettrometro di massa. Sorgente ionica a impatto elettronico. Sistemi di introduzione per campioni solidi, liquidi e gassosi. Analizzatore magnetico e sua equazione fondamentale. Potere risolutivo. Analizzatore quadrupolare e a tempo di volo. Rivelatore e registratore. Picco molecolare, picchi isotopici, picco base, picchi metastabili. Regola dell'azoto. Determinazione della composizione elementare dello ione molecolare. Principali meccanismi di frammentazioni: scissioni semplici omolitiche ed eterolitiche, scissioni con riarrangiamento. Fattori che regolano gli schemi generali di frammentazione. Frammentazioni tipiche di alcani, alcheni, alchini, cicloalcani, cicloalcheni, idrocarburi aromatici, alcoli, fenoli, eteri, tioli, tiofenoli, tioeteri, aldeidi, chetoni, esteri, acidi, anidridi, ammidi, ammine, nitrili, isocianati, nitrocomposti, composti alogenati. Chemical Ionization. Fast Atom Bombardment. Gascromatografo e HPLC accoppiati allo spettrometro di massa. Elettrospray. MALDI-TOF.</p> <p>Esercitazioni in aula sull'interpretazione di spettri IR, UV, NMR e di Massa di composti organici a struttura incognita.</p> |
| Testi di riferimento | <p>R. M. SILVERSTEIN, F. X. WEBSTER- Identificazione Spettroscopica di Composti Organici- Casa Editrice Ambrosiana.</p> <p>M. HESSE, H. MEIER, B. ZEEH - Metodi Spettroscopici nella Chimica Organica- Edises</p> <p>WHITTAKER D. - Interpretation of Organic Spectra - RSC.</p> <p>E. PRETSCH, P. BUHLMANN, C. AFFOLTER - Structure Determination of Organic Compounds Table of spectral data - Springer.</p> <p>D. L. PAVIA, G. M. LAMPMAN E G. S. KRIZ - Introduction to Spectroscopy: a Guide for Students of Organic Chemistry - Saunders Golden Sunburst Series - Saunders College Publishing - Philadelphia. London - Toronto.</p> |
| Note ai testi di riferimento | Ulteriore materiale didattico in forma di file pdf verrà fornito all'inizio del corso. |

| | | | |
|---------------------------------------|--------------------|--|--------------------|
| Organizzazione della didattica | | | |
| Ore | | | |
| Totali | Didattica frontale | Pratica (laboratorio, campo, esercitazione, altro) | Studio individuale |
| 200 | 70 | 10 | 120 |



| CFU/ETCS | | | |
|--|---|--|--|
| 8 | 7 | 1 | |
| Metodi didattici | | | |
| | | Didattica frontale con lezioni in aula. Casi studio e lavoro di gruppo per la parte di esercitazione. Il corso non è erogato in modalità e-learning | |
| Risultati di apprendimento previsti | | | |
| Conoscenza e capacità di comprensione | | <ul style="list-style-type: none">○ Conoscenza dei criteri di scelta e utilizzo delle principali tecniche spettroscopiche per l'analisi strutturale.○ Conoscenza della strumentazione per analisi strutturale molecolare. | |
| Conoscenza e capacità di comprensione applicate | | <ul style="list-style-type: none">○ Conoscenza delle componenti delle strumentazioni presentate a lezione per l'analisi strutturale.○ Conoscere i criteri per selezionare ed utilizzare tecniche analitiche per la valutazione della struttura molecolare.○ Conoscere la successione corretta per eseguire una analisi strutturale e le regole di sicurezza da applicare nel laboratorio. | |
| Competenze trasversali | | <ul style="list-style-type: none">● Autonomia di giudizio<ul style="list-style-type: none">○ Esprimere ipotesi ragionevoli per validare procedure idonee all'indagine strutturale di un campione incognito.● Abilità comunicative<ul style="list-style-type: none">○ Descrivere le principali metodiche e strumentazioni impiegate per analisi strutturale di miscele organiche.● Capacità di apprendere in modo autonomo<ul style="list-style-type: none">○ Capacità di approfondire e aggiornare in autonomia le conoscenze inerenti metodi e tecniche strumentali per la moderna indagine chimica. | |
| Valutazione | | | |
| Modalità di verifica dell'apprendimento | | <p>L'esame di profitto consiste in una prova scritta propedeutica alla prova orale coerentemente con gli argomenti sviluppati durante le lezioni teoriche e le esercitazioni in aula, come riportato nel Regolamento Didattico del Corso di Laurea in CTF e nel piano di studio.</p> <p>L'esito della prova scritta concorre alla valutazione dell'esame di profitto. La prova sarà valutata in trentesimi ed in caso di esito positivo, nella prova orale finale il colloquio verterà sulla restante parte dei contenuti dell'insegnamento.</p> <ul style="list-style-type: none">- La Prova scritta ha durata di 150 minuti durante i quali lo studente deve risolvere un esercizio sull'analisi strutturale.- La valutazione finale tiene conto della prova scritta e della prova orale.- Gli studenti possono utilizzare tutto il materiale fornito durante il corso per lo svolgimento della prova scritta.- I risultati della prova scritta vengono comunicati mediante piattaforma esse3.- Le prove precedenti sono di norma messe a disposizione degli studenti. | |
| Criteri di valutazione | | <ul style="list-style-type: none">● <i>Autonomia di giudizio:</i> <i>Capacità di formulare concetti coerenti con le nozioni fornite durante il corso.</i>● <i>Abilità comunicative:</i> Capacità di ragionamento critico Qualità dell'esposizione e appropriatezza del linguaggio scientifico | |



| | |
|--|--|
| | <p>conseguito.</p> <ul style="list-style-type: none">• Capacità di apprendere: Capacità di approfondire e aggiornare in autonomia le conoscenze inerenti metodi e tecniche strumentali per la moderna indagine strutturale. |
| Criteria di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale | <p>La valutazione della preparazione dello studente avviene sulla base dei seguenti criteri: Completezza e correttezza delle informazioni, chiarezza espositiva dei concetti sviluppati durante il corso. Giudizio critico.</p> <p>L'esame di profitto degli studenti stranieri può essere svolto in lingua inglese secondo le modalità sopra descritte.</p> |
| Altro | |
| | |