



# UNIVERSITÀ DI PISA

---

## STEREOCHIMICA

### LORENZO DI BARI

Anno accademico	2020/21
CdS	CHIMICA
Codice	210CC
CFU	6

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
STEREOCHIMICA	CHIM/06	LEZIONI	48	LORENZO DI BARI GENNARO PESCELLI

#### Obiettivi di apprendimento

##### *Conoscenze*

Il Corso di Stereochimica completerà la formazione degli studenti sulla stereochimica organica. Al termine del corso, lo studente avrà acquisito un'approfondita conoscenza:

- del corretto lessico;
- della stereochimica dei composti lineari e ciclici;
- dei metodi sperimentali per l'analisi conformazionale;
- dei principi base che sovrintendono alle reazioni stereoselettive e stereospecifiche;
- degli aspetti teorici di base delle spettroscopie chiroottiche e dei relativi metodi sperimentali per la determinazione della configurazione assoluta;
- dell'impiego delle spettroscopie chiroottiche per la risoluzione di problematiche strutturali diverse

##### *Modalità di verifica delle conoscenze*

Gli studenti verranno continuamente stimolati all'intervento critico durante le lezioni frontali, per verificare la comprensione degli argomenti trattati in tempo reale.

##### *Capacità*

Al termine del corso lo studente sarà in grado di:

- Avanzare ipotesi sulla conformazione più stabile di porzioni di molecole organiche;
- Interpretare i dati relativi alla stereoselettività delle reazioni organiche;
- Proporre esperimenti per l'analisi conformazionale e discuterne i risultati;
- Interpretare a livello qualitativo gli spettri di dicroismo circolare di semplici molecole organiche;
- Pianificare esperimenti necessari alla determinazione della configurazione assoluta.

##### *Modalità di verifica delle capacità*

Durante le lezioni si discuterà di casi presi dalla recente letteratura.

##### *Comportamenti*

Lo studente acquisirà un atteggiamento critico e consapevole nei confronti della letteratura di stereochimica organica. Di fronte a una rappresentazione bidimensionale di una struttura molecolare, lo studente sarà in grado di individuare i punti di maggiore rilevanza per comprendere la struttura tridimensionale sia in senso statico (conformerò più abbondante) sia dinamico (distribuzione conformazionale e barriere energetiche). Di fronte ad una struttura molecolare chirale, lo studente sarà in grado di pianificare le modifiche e gli esperimenti da mettere in atto per assegnarne la configurazione assoluta.

##### *Modalità di verifica dei comportamenti*

Durante le esercitazioni in aula e i ricevimenti si potrà valutare la maturazione degli strumenti critici.

##### *Prerequisiti (conoscenze iniziali)*

Conoscenza di struttura e reattività organica di base; fondamenti della stereochimica; interazioni non covalenti; principali concetti di termodinamica dell'equilibrio e di cinetica chimica.



## UNIVERSITÀ DI PISA

---

### Indicazioni metodologiche

Il corso consiste in lezioni frontali alla lavagna e con l'uso di videoproiettore. La discussione e l'intervento degli studenti sono continuamente stimolati.

### Programma (contenuti dell'insegnamento)

Stereochimica classica dei composti organici aciclici e ciclici. Considerazioni termodinamiche e cinetiche. Entalpie conformazionali.

Metodi cromatografici per l'analisi di miscele stereoisomeriche. Cromatografia diastereoselettiva ed enantioselettiva. Isomerizzazione in colonna e analisi dei profili dinamici.

Metodi di risoluzione di miscele di enantiomeri: cristallizzazione e risoluzioni cinetiche.

Richiamo dei principali metodi NMR per lo studio conformazionale (NOE e costanti di accoppiamento). Metodi basati sull'anisotropia magnetica: correnti d'anello. NMR paramagnetica: spostamenti di contatto, pseudocontatto e velocità di rilassamento.

Dicroismo circolare elettronico (ECD): Definizioni e principi di funzionamento. Il concetto di cromoforo e di perturbatore. Significato dei momenti di dipolo di transizione e loro relazione con la simmetria. Principali approcci interpretativi degli spettri ECD: metodi empirici, semiempirici, non empirici. Metodo degli oscillatori accoppiati: descrizione e caratterizzazione delle transizioni elettroniche nei principali cromofori organici; scelta dei cromofori usati come sonde chiroottiche. Cenni sul CD vibrazionale (VCD) e sulle altre tecniche chiroottiche. Principi ed applicazione dell'ECD in problemi di stereochimica supramolecolare.

### Bibliografia e materiale didattico

Eliel, Wilen, Doyle, *Basic Organic Stereochemistry* Wiley, 2001

Anslyn, E. V.; Dougherty, D. A. *Modern Physical Organic Chemistry* University Science Books, 2006.

Vasta letteratura e slide del corso disponibili sulla piattaforma Moodle.

### Modalità d'esame

L'esame consiste in una prova orale, cui partecipano i docenti del corso, possibilmente coadiuvati da colleghi e cultori della materia. Viene chiesto di esporre un argomento del corso a scelta, che costituisce la base per una discussione su tutto il programma. Lo studente deve proporre soluzioni ad almeno un caso pratico, quale ad esempio: come determinare la configurazione di un composto; come stimare la distribuzione conformazionale; come conseguire la risoluzione di una miscela di stereoisomeri.

Ultimo aggiornamento 28/07/2020 12:27