UNIVERSITÀ DI PISA

STEREOCHIMICA

LORENZO DI BARI

Academic year	2022/23
Course	CHIMICA
Code	210CC
Credits	6

Modules	Area	Type	Hours	Teacher(s)
STEREOCHIMICA	CHIM/06	LEZIONI	48	LORENZO DI BARI GENNARO PESCITELLI

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 soprintendono 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 stereo selettività 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 (conformero 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.

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)

Sterochimica 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 24/08/2022 19:02