UNIVERSITÀ DI PISA

METODI FISICI IN CHIMICA ORGANICA

LORENZO GUAZZELLI

Anno accademico	2020/21
CdS	CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE
Codice	029CC
CFU	6

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
METODI FISICI IN CHIMICA ORGANICA	CHIM/06	LEZIONI	47	LORENZO GUAZZELLI

Obiettivi di apprendimento

Conoscenze
Il corso ha lo scopo di fornire allo studente iscritto al corso di studio in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche i concetti fondamentali di alcune tecniche spettrometriche per poter effettuare l'analisi strutturale, conformazionale e configurazionale di molecole organiche. Obiettivo formativo primario è fornire le conoscenze fondamentali necessarie per la comprensione delle singole tecniche e contemporaneamente per la loro applicazione nella pratica quotidiana in un laboratorio di sintesi, analisi e più in generale ogni qual volta sia necessaria l'identificazione di strutture organiche. Particolare enfasi viene data alla deduzione della struttura mediante l'applicazione combinata delle diverse tecniche.

Modalità di verifica delle conoscenze
Le conoscenze verranno verificate durante il corso, nelle prove di lettura degli spettri in aula, o negli incontri tra docenti e studenti.

Capacità
Lo studente acquisirà la capacità di applicare le conoscenze assimilate per ottenere informazioni strutturali, configurazionali e conformazionali relative a molecole organiche attraverso la lettura di spettri IR, NMR, CD, ORD e MS.

Modalità di verifica delle capacità
Durante il corso saranno svolte prove di esecuzione di spettri IR ed UV e di lettura di spettri IR, UV, NMR e MS.

Comportamenti
Lo studente potrà acquisire la capacità di identificare un composto organico incognito attraverso la lettura di spettri

Modalità di verifica dei comportamenti
Durante il corso sarà monitorata la capacità di lettura di spettri

Prerequisiti (conoscenze iniziali)
Conoscenze di base della chimica organica (orbitali, orbitali ibridi, teoria della risonanza, equilibri e termodinamica, acidi-basi, proprietà dei principali gruppi funzionali).
Conoscenze di base di fisica (le radiazioni elettromagnetiche, campi elettrici e magnetici).

Indicazioni metodologiche

- le lezioni frontali si svolgeranno con ausilio di slides e filmati.
- le esercitazioni in aula si svolgeranno con ausilio di slides.
- le esercitazioni in laboratorio verranno effettuate dividendo gli studenti in gruppi di lavoro.
- durante il corso verrano indicati possibili strumenti di supporto (es.: siti web)
- personale di supporto e codocenti aiuteranno gli studenti ad acquisire un metodo efficace di interpretazione degli spettri
- l'interazione tra studente e docente sarà garantità da ricevimenti ed uso della posta elettronica

Programma (contenuti dell'insegnamento)

UNIVERSITÀ DI PISA

Introduzione alla spettroscopia: radiazione elettromagnetica. Tipi di spettroscopie: assorbimento, emissione, scattering.
Spettroscopia di assorbimento Infrarosso: aspetti teorici, spostamenti della frequenza di gruppo. Interpretazione degli spettri IR.
Spettroscopia di assorbimento UV-vis: orbitali molecolari, transizioni elettroniche. Il cromoforo etilenico, carbonilico ed aromatico. Effetto della coniugazione e della presenza di auxocromi su questi cromofori.
Metodi chirottici: spettri di dispersione ottica rotatoria e dicroismo circolare. Determinazione della configurazione assoluta. Il cromoforo carbonilico: cicloesanoni ed enoni. Cromoforo benzenico. Accoppiamento eccitonico e regole di chiralità.
Spettrometria di risonanza magnetica.
Spettroscopia del protone: costante di schermo. Fattori responsabili dell'effetto di schermo. Contributo diamagnetico e paramagnetico. Fattori che influenzano la costante di schermo diamagnetica. Effetti di anisotropia diamagnetica. Protoni scambiabili ed effetto del legame ad idrogeno.
Accoppiamenti di spin: molteplicità e meccanismo. Equivalenza chimica. Equivalenza magnetica. Sistemi di Spin: analisi del primo ordine. Sistemi conformazionalmente mobili. Sistemi di ordine superiore. Chiralità. Accoppiamenti protone-protone: costanti di accoppiamento geminale, vicinale e a lunga distanza. Accoppiamento del protone ad altri nuclei. Disaccoppiamento di spin. Reagenti di shift.
Spettrometria del carbonio. Aspetti generali. Intensità dei picchi. Equivalenza del chemical shift. Intervallo di chemical shift per i carboni. Costanti di accoppiamento C-H. Esperimenti DEPT.
Spettrometria di massa. Introduzione. Ionizzazione. Processi di frammentazione. Analizzatori: a deflessione magnetica, quadrupolo, trappola ionica, tempo di volo e MS/MS. Spettri di massa: determinazione del peso molecolare. Spettri di massa di alcune classi di composti organici.

Bibliografia e materiale didattico

Teoria:
Tecniche Spettroscopiche ed Identificazione di Composti organici. C. Chiappe, F. D'Andrea - ETS ED.
Metodi spettroscopici in Chimica Organica. M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh - EdiSES

Esercizi:
Tecniche Spettroscopiche ed Identificazione di Composti organici. Problemi svolti e da svolgere C. Chiappe, F. D'Andrea, G. Abbandonato- ETS ED.

Modalità d'esame

L'esame ha luogo in un'unica sessione. Esso prevede l'iniziale compilazione di un test rapido (20 min) in parte a risposte multiple. Se superato, vengono forniti allo studenti gli spettri IR, NMR e di Massa di un composto organico incognito. Lo studente discute con il docente le informazioni dedotte ed utilizzate per stabilire la struttura del composto incognito.
Se saranno mantenute le modalità di esame a distanza, l'esame prevede un pretest di analisi di spettri seguito per coloro che superano questa parte da un esame orale sul programma svolto.

Ultimo aggiornamento 26/08/2020 11:16