

<i>Attività formativa</i>	18039 - Caratterizzazione Strutturale di Composti Organici
<i>Modulo didattico</i>	
<i>CFU</i>	9
<i>Ore</i>	72
<i>Metodo didattico</i>	lezioni frontali
<i>Obiettivo formativo</i>	Al termine del corso lo studente possiede le conoscenze per poter identificare e caratterizzare una sostanza organica utilizzando le metodologie spettroscopiche e strumentali più diffuse nei laboratori dell'industria chimico-farmaceutica. In particolare è in grado sia di interpretare le caratteristiche fondamentali degli spettri forniti da ogni sostanza (UV, IR, NMR, Massa), sia di decidere quali metodiche siano più utili per risolvere un particolare problema.

<i>Tematica</i>			<i>Lezioni</i>		
Tema	Obiettivo	Ore		Argomenti	Ore
Interazione luce-materia	Lo studente conosce l'organizzazione del corso e le modalità di verifica dell'apprendimento. Si illustrano i concetti fondamentali della radiazione elettromagnetica e di come quest'ultima interagisca con le molecole organiche.	6	1	Organizzazione delle lezioni e modalità di verifica dell'apprendimento. Si illustra la suddivisione del corso nella descrizione delle varie tecniche strumentali.	2
			2	Principio di quantizzazione dell'energia dei sistemi atomici e molecolari. Proprietà della radiazione elettromagnetica.	2
			3	Principali meccanismi di rilassamento degli stati eccitati. Regole di selezione per transizioni tra diversi livelli energetici.	2

Spettroscopie ottiche	Lo studente conosce le tecniche con le quali si studia l'assorbimento o l'emissione da parte di molecole organiche di una radiazione elettromagnetica nel campo dell'ultravioletto e del visibile e quali informazioni strutturali sono ottenibili da tali tecniche	20	4	Spettroscopia UV e visibile. La legge di Lambert e Beer. Classificazioni delle transizioni elettroniche sulla base del metodo degli Orbitali Molecolari. Cromofori: polieni, anelli aromatici, gruppi carbonilici. L'identificazione di transizione n-pi greco*. Effetto dei sostituenti e del solvente sulle transizioni elettroniche. Informazioni strutturali ottenibili da uno spettro elettronico. Esempi di applicazione.	10
			5	Dicroismo lineare e sistemi orientati. Dicroismo circolare e dispersione rotatoria di sostanze otticamente attive. Esempi di applicazione	4
			6	Spettroscopia di fluorescenza. Natura degli stati elettronici eccitati. Diagramma di Jablonski. Resa quantica della fluorescenza. Conversione interna e principio di Franck-Condon. Fosforescenza. Quenching della fluorescenza. Sonde fluorescenti e green fluorescent protein. Polarizzazione della fluorescenza.	6
Spettroscopia infrarossa e rotazionale	Lo studente conosce la tecnica con la quale si studia l'assorbimento da parte di molecole organiche di una radiazione elettromagnetica nel campo dell'infrarosso e delle microonde e quali informazioni strutturali sono ottenibili da tale tecnica	10	7	Spettroscopia infrarossa: i modelli dell'oscillatore armonico e anarmonico. Regole di selezione per transizioni vibrazionali. Popolazione dei livelli e intensità delle righe spettrali. Struttura fine rotazionale	4

			8	Frequenze di scheletro e frequenze di gruppo. Impronta digitale. Riconoscimento di gruppi funzionali. Applicazione alla determinazione della struttura delle molecole organiche	6
Spettroscopie di risonanza magnetica nucleare	Lo studente conosce le tecniche con le quali si studia l'assorbimento da parte di molecole organiche di una radiazione elettromagnetica nel campo delle onde radio e in presenza di un campo magnetico (spettroscopia di risonanza magnetica nucleare) e quali informazioni strutturali sono ottenibili da tali tecniche	18	9	Momento angolare di spin nucleare. Quantizzazione del momento angolare. Momento magnetico dei nuclei. Nuclei attivi magneticamente. Interazione Zeeman tra spin nucleari e campo magnetico esterno. Popolazione dei livelli di spin. Regole di selezione e frequenze di transizione	4
			10	Lo spostamento chimico e i fattori strutturali che ne determinano la grandezza	2
			11	Interazione di accoppiamento spin-spin tra due nuclei. Lo spettro dell'acido fluoridrico. Spettri di sistemi AX e AB. Definizione di spettri del primo ordine e di ordine superiore. Costanti di accoppiamento e struttura chimica: accoppiamenti vicinali e geminali. Equazione di Karplus. Effetti dinamici	4
			12	Esempi di interpretazione di spettri NMR al protone.	4
			13	Il problema della sensibilità strumentale. Tecniche impulsate. Trasformata di Fourier. Spettri al carbonio-13. Tecniche di disaccoppiamento. Esempi di interpretazione di spettri NMR al carbonio-13	4

Spettrometria di massa	Lo studente conosce la tecnica (spettrometria di massa) con la quale si misura la massa molecolare di un composto organico e quali informazioni strutturali sono ottenibili da tale tecnica	10	14	Principi generali della spettrometria di massa.: ionizzazione, separazione degli ioni, rivelazione degli ioni. Ionizzazione per impatto elettronico. Ionizzazione chimica. Ionizzazione elettrospray, MALDI	2
			15	Analizzatore magnetico. Misura di masse elevate. Analizzatore di massa a tempo di volo Analizzatori di massa a quadrupolo. Determinazione della massa esatta. Spettrometria di massa tandem	2
			16	Ione molecolare. Composizione isotopica di una molecola. Frammentazioni di composti organici	2
			17	Principali reazioni di frammentazione di molecole organiche. Scissione in posizione beta. Scissione benzilica ed alillica. Scissione di legami "non attivati". Trasposizione di McLafferty. Reazione onio. Eliminazione di CO	4
Determinazione delle struttura di molecole organiche	Lo studente mette a frutto le conoscenze delle metodologie spettroscopiche e strumentali descritte nel corso per poter identificare e caratterizzare una sostanza organica. In particolare è in grado sia di interpretare le caratteristiche fondamentali degli spettri forniti da ogni sostanza (UV, IR, NMR, Massa), sia di decidere quali metodiche siano più utili per risolvere un particolare problema	8	18	Formula molecolare. Determinazione del grado d'insaturazione. Strategie per la determinazione della struttura di una molecola organica sulla base dell'interpretazione degli spettri UV, IR, NMR e di Massa. Esempi di determinazione della struttura di molecole organiche.	8