PARTE A CURA DELLA U.O. DIDATTICA E SERVIZI AGLI STUDENTI

Principali informazioni sull'insegnamento	
Denominazione insegnamento	Meccanismi di Reazione
Corso di studio	Scienze Chimiche
Classe di laurea	LM-54
Crediti formativi (CFU)	6
Obbligo di frequenza	Si
Lingua di erogazione	italiano
Anno Accademico	2018/2019

Docente responsabile	
Nome e Cognome	Lucia D'Accolti
indirizzo mail	lucia.daccolti@uniba.it
telefono	080-5442068

Dettaglio insegnamento	Ambito disciplinare	SSD	tipologia attività
		CHIM/06	Attività caratterizzanti

Erogazione insegnamento	Anno di corso	Semestre
	I	II

Modalità erogazione	CFU lez	Ore lez	CFU lab	Ore lab	CFU eserc	Ore eserc	CFU eserc campo	Ore eserc campo
	5	40	0	0	1	15	0	0

Organizzazione della didattica	ore totali	ore insegnamento	ore studio individuale
	150	55	95

Calendario	Inizio attività didattiche	Fine attività didattiche

PARTE A CURA DEL DOCENTE

Syllabus	
Prerequisiti	Conoscenze di base della Chimica Organica e della Chimica Fisica della Laurea Triennale
Risultati di apprendimento attesi *(declinare rispetto ai Descrittori di Dublino) (si raccomanda che siano coerenti con i risultati di apprendimento del CdS, riportati nei quadri A4a, A4b e A4c della SUA, compreso i risultati di apprendimento trasversali)*	
Conoscenza e capacità di comprensione	Conoscere e comprendere gli aspetti meccanicistici della chimica organica allo scopo di spiegare e controllare la reattività delle reazioni organiche.
Capacità di applicare conoscenza e comprensione	Acquisizione di procedure metodologiche e strumentali ad ampio spettro per razionalizzare le reazioni organiche allo scopo di poterle applicare anche in campo industriale
Autonomia di giudizio	Acquisizione di consapevole autonomia nel programmare una sintesi valutandone la reale fattibilità, e giudizio nel valutare e quantificare i risultati.
Abilità comunicative	Capacità di comunicare in forma scritta e orale, in italiano ed in inglese, anche con utilizzo di sistemi multimediali; capacità di presentare una propria attività di ricerca o di rassegna ad un pubblico di specialisti o di profani; capacità di sostenere un contradditorio sulla base di un giudizio sviluppato autonomamente su una problematica inerente la chimica organica.

Capacità di apprendimento	Capacità di recuperare agevolmente le informazioni dalla letteratura, banche dati ed internet. Capacità personali nel ragionamento logico e nell'approccio critico al problema organico posto in qualunque ambito lavorativo.

Programma	
Contenuti dell'insegnamento	***Introduzione allo studio dei meccanismi di reazione***. Protocollo d'indagine dei meccanismi di reazione. Criteri basati sullo studio dei prodotti: studio meccanicistico della reazione di von Richter. Criteri cinetici: velocità assoluta e relativa; correlazioni di energia libera. Teorie cinetiche: a) degli urti in fase gas e in soluzione, b) dello stato di transizione (TS). Calcolo della velocità assoluta di reazione: superficie di energia potenziale, diagramma di contorno, diagramma di sezione. Percorso di minima energia: principio di reversibilità microscopica; postulato di Hammond.. Effetto isotopo cinetico primario e secondario. Esempi ***Principio di Bell-Evans-Polanyi*** (BEP). Corollari del principio BEP: correlazioni di energia libera, principio di reattività/selettività, postulato di Hammond. Sostituzione elettrofila aromatica: selettività inter- e intramolecolare (eq. di Brown). Limiti di estrapolabilità della relazione Ea/ΔHreaz. ***Effetto dei sostituenti.*** Origine empirica dell'equazione di Hammett. Tabella dei σ normali di Hammett. Meccanismi di trasmissione dell'effetto elettronico: a) induttivo, b) di campo (modello di Kirkwood-Weistheimer), c) coniugativo. Trasmissione dell'effetto elettronico dalla posizione meta e para. σI (iduttivo) e σR (di risonanza). Coniugazione incrociata: σ –, σ+ e σ° di Taft; equazioni di Yukawa-Tsuno e di Yoshioka-Hamamoto. Equazioni multiparametriche (Taft, Jaffé): σI, σR. Sigma induttivi: σ'. Significato di ρ. Influenza del solvente sul valore di ρ. Valore di ρ nelle reazioni a stadi. Alcuni esempi dell'effetto del sostituente. ***Effetto solvente***. Classificazione dei solventi. Costante dielettrica, momento di dipolo, polarizzabilità. Ioni liberi, coppia ionica intima e coppia ionica separata dal solvente. Teoria dell'effetto solvente di Hughes-Ingold. Correlazione tra effetto solvente e costante dielettrica (polarità) o indice di rifrazione (polarizzabilità). Effetto solvente: contributo entalpico ed entropico. Trattamento termodinamico dell'effetto solvente. ***Nucleofilicità/basicità***. Definizione hard/soft di acidi e basi. Principio HSAB di Pearson. ***Catalisi acida e basica*** generale e specifica Velocità dei processi di trasferimento protonico. Andamenti tipici logk/pH. Determinazione delle singole costanti cinetiche di un processo acido- o base-catalizzato. Costanti di acidità in mezzi non acquosi. ***Effetto sale***: primario, secondario. Effetto sale e catalisi basica nella sostituzione nucleofila aromatica con ammine. Effetto rallentante dello ione comune. Reazione di ritorno esterno/interno in reazioni di solvolisi. ***Teoria degli Orbitali di Frontiera*** e ***Reazioni pericicliche***. Applicazione della teoria FMO (Frontier Molecular Orbital) ad alcune reazioni chimiche con esempi. **Imparare a scrivere un meccanismo di reazione ragionevole:** applicazione dei modelli teorici per la sintesi di composti organici di interesse industriale.
Testi di riferimento	Dispense e appunti di lezione Modern Physical Organic Chemistry Eric V. Anslyn Dennis A. Dougherty (University Science Book) The art of writing reasonable organic reaction mechanism
Note ai testi di riferimento	
Metodi didattici	Lezione frontali mediante impiego di powerpoint elezione alla lavagna, esercizi in aula
Metodi di valutazione *(indicare almeno la tipologia scritto, orale, altro)*	Colloquio orale ed impiego di lavagna tradizionale
Criteri di valutazione *(per ogni risultato di*	Saper applicare metodi quantitativi della chimica organica essenzialmente basati su misure indirette di energia libera e sulla teoria perturbativa della reattività, allo studio

apprendimento atteso su indicato, descrivere cosa ci si aspetta lo studente conosca o sia in grado di fare e a quale livello al fine di dimostrare che un risultato di apprendimento è stato raggiunto e a quale livello)	meccanicistico delle reazioni organiche: polari, radicaliche e pericicliche.
Altro	