

SSD CHIM/06		Metodi fisici in Chimica Organica		
		Prof.ssa Roberta MUSIO		
Docente corso A-B	Telefono: 080 5442037 Orario ricevimento: giovedì 12-14	e-mail: roberta.musio@uniba.it Presso: Dipartimento di Chimica		
Attività	Lezioni frontali	Esercitazioni	Laboratorio	Totale
Crediti	4	2		6
Ore attività	32	30		62
Ore studio				
Pre-requisiti	Per una frequenza proficua del corso è necessario che lo studente abbia acquisito una buona padronanza dei principi della fisica classica (in particolare della teoria dell'elettromagnetismo), della meccanica quantistica e della chimica organica			
Obiettivi di Base	Fornire allo studente le conoscenze di base dei fondamenti teorici e delle applicazioni delle principali tecniche spettroscopiche (NMR, IR e UV) utilizzate nell'analisi strutturale di molecole organiche.			
Obiettivi Formativi	Imparare a determinare la struttura di composti organici semplici mediante spettroscopia NMR, IR e UV			
Contenuto	<p>LEZIONI FRONTALI Introduzione generale alla determinazione strutturale di una molecola organica. Utilità delle tecniche spettroscopiche presentate nel corso. Radiazioni elettromagnetiche; richiamo dei principi generali di spettroscopia; Spettroscopia NMR</p> <ul style="list-style-type: none"> • Introduzione: spin elettronico e momenti angolari elettronici; spin nucleare e momento angolare di spin nucleare, momento magnetico di spin nucleare; nuclei magneticamente attivi (nuclei con spin $\frac{1}{2}$ e nuclei quadrupolari); rapporto magnetogirico. • <u>Basi teoriche del fenomeno della risonanza magnetica nucleare (NMR)</u> <ul style="list-style-type: none"> - <u>Comportamento di un nucleo magneticamente attivo (protone) in un campo magnetico statico</u>: analogie con il comportamento di una calamita in un campo magnetico ed effetto Zeeman; moto di precessione nucleare e analogie con il comportamento di una trottola nel campo gravitazionale terrestre; descrizione classica del moto di precessione; frequenza di risonanza di Larmor. - <u>Comportamento di un insieme di nuclei magneticamente attivi (protoni) in un campo magnetico statico</u>: orientazione dei singoli momenti magnetici nucleari e magnetizzazione macroscopica; distribuzione di popolazione dei livelli energetici e sensibilità della tecnica NMR. • <u>Principali parametri NMR</u> <ul style="list-style-type: none"> - <u>Integrali</u>, intensità e larghezze dei segnali. Misura degli integrali - <u>Chemical shift</u>: origine della costante di schermo nucleare nel protone, formula di Lamb. Approssimazione di Ramsey: costante di schermo diamagnetica e paramagnetica. Definizione di una scala di chemical shift. Scala di chemical shift per il protone. Fattori elettronici e strutturali che influenzano la costante di schermo del protone: effetto induttivo e mesomero, anisotropia magnetica (correnti di anello in benzene, annuleni, porfirine, effetto di elettroni π in alcheni, alchini e carbonili), legame idrogeno, effetto del solvente. - <u>Costante di accoppiamento di spin nucleare e molteplicità del segnale</u>: interazioni fra momenti magnetici nucleari; origine della costante di accoppiamento trasmessa attraverso gli elettroni di legame; molteplicità del segnale (triangolo di Pascal e diagrammi ad albero). Costanti di accoppiamento J(H-1/H-1) geminali, vicinali e long-range e loro utilità nella determinazione della struttura di un composto organico: Dipendenza delle J da fattori strutturali ed elettronici, equazione di Karplus. Cenni sulle costanti di accoppiamento trasmesse attraverso lo spazio. • <u>Equivalenza chimica e magnetica. Sistemi di spin</u> <ul style="list-style-type: none"> - . Nuclei debolmente e fortemente accoppiati, spettri NMR del I e del II ordine. Definizione di equivalenza chimica e magnetica. Sistemi di spin e loro classificazione secondo la notazione di Pople. • <u>Spettroscopia C-13 NMR</u>: scala di chemical shift • Magnetizzazione macroscopica: sua origine e dipendenza da campo magnetico applicato, concentrazione, abbondanza isotopica e temperatura. Sensibilità della tecnica NMR. • Spettri NMR in onda continua. • Spettri NMR in trasformata di Fourier: tecniche a impulsi. Effetto di un impulso sulla magnetizzazione, equazioni di Bloch per la precessione della magnetizzazione. Rilassamento longitudinale e trasversale della magnetizzazione. Acquisizione del Free Induction Decay. Principi della trasformata di Fourier. 			

Contenuto	<p>Spettroscopia IR</p> <ul style="list-style-type: none"> Oscillatore armonico. Quantizzazione dell'energia vibrazionale. Energia vibrazionale di molecole biatomiche. Moti traslazionali, vibrazionali e rotazionali di una molecola e modi normali di vibrazione. Moti di stretching e bending. Intensità dei segnali IR. Spettri IR di CO, CO₂ e H₂O. Regioni principali di uno spettro IR. Spettri IR di alcani, alcheni, alchini, eteri, alcoli, ammine, benzene sostituiti, composti carbonilici (aldeidi, chetoni, acidi carbossilici, esteri, ammidi) <p>Cenni di spettroscopia UV</p> <p>ESERCITAZIONI</p> <p>Individuazione dei sistemi di spin in una molecola</p> <p>Chemical shift di H-1 e C-13 nei più comuni gruppi funzionali organici. Additività dell'effetto dei sostituenti e calcolo del chemical shift del protone in alcani (regole di Shooley), alcheni, benzeni sostituiti.</p> <p>Interpretazione di spettri H-1 NMR, C-13 NMR e IR di alcani, alcheni, alchini, benzeni mono- e disostituiti, alcoli, ammine, eteri e composti carbonilici (aldeidi, acidi carbossilici, chetoni, esteri, ammidi)</p>	
Testi consigliati	<p>Libro di testo:</p> <p>R. M. Silverstein, F. X. Webster, D. J. Kiemle, <i>Identificazione Spettrometrica di Composti Organici</i>, Casa Editrice Ambrosiana, II ed., 2006.</p> <p>Testi per approfondimento:</p> <p>R. K. Harris, <i>Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy</i>, Longman Publishing Group, 1986.</p> <p>H. Gunther, <i>NMR Spectroscopy: Basic Principles, Concepts, and Applications in Chemistry</i>, Wiley, 1995, II ed.</p>	
Propedeuticità	<p>Obbligatorie</p> <p>Chimica Organica I</p>	<p>Consigliate</p> <p>Fisica II</p> <p>Chimica Organica II</p> <p>Chimica Fisica II</p>
Metodi di valutazione	<p>Prova scritta</p> <p>SI</p>	<p>Colloquio orale</p> <p>SI</p>
Collocazione	<p>Anno di Corso</p> <p>III</p>	<p>Semestre</p> <p>I</p>

