

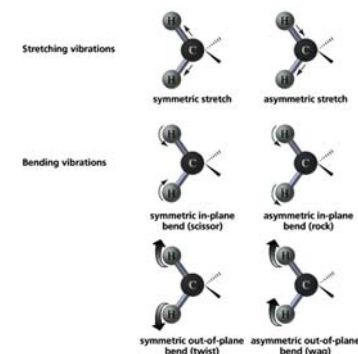
La spettroscopia infrarossa

Uno spettro infrarosso si ottiene investendo e facendo attraversare il campione da radiazione infrarossa

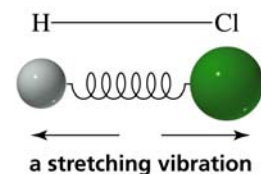
$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

Alte energie sono associate con alte frequenze, alti numeri d'onda, piccole lunghezze d'onda

I legami covalenti delle molecole vibrano continuamente

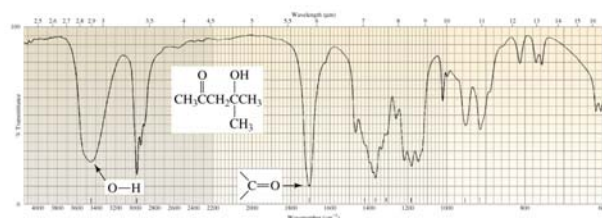


Ogni vibrazione di piegamento o stiramento avviene con una propria caratteristica frequenza

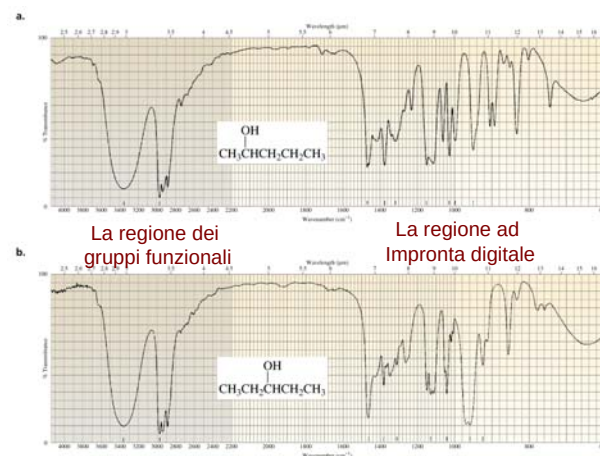


**Spettrometria di massa
e spettroscopia
infrarossa**

Uno spettro infrarosso



Le punte sono bande di assorbimento

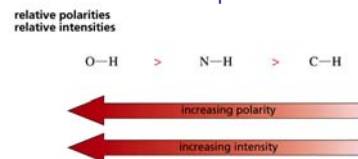


Serve più energia per stirare un legame che per piegarlo

Type of bond	Wavenumber (cm ⁻¹)	Intensity
C≡N	2260–2220	medium
C=C	2260–2100	medium to weak
C=C	1680–1600	medium
C=N	1650–1550	medium
Cyclohexene	~1600 and ~1500–1430	strong to weak
C=O	1780–1650	strong
C–O	1250–1050	strong
C–N	1230–1020	medium
O–H (alcohol)	3650–3200	strong, broad
O–H (carboxylic acid)	3300–2500	strong, very broad
N–H	3500–3300	medium, broad
C–H	3300–2700	medium

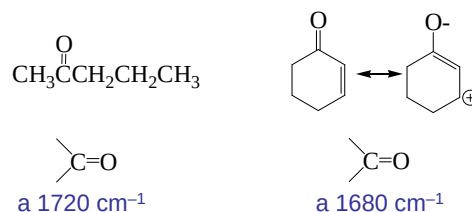
Più è grande il cambiamento del momento di dipolo, maggiore è l'intensità della banda

Quando si stira un legame, l'aumento della distanza tra gli atomi aumenta il momento di dipolo



L'ordine di legame influenza la forza del legame, per cui l'ordine del legame influenza la posizione delle bande di assorbimento

La posizione precisa di una banda di assorbimento dipende dalla delocalizzazione degli elettroni, dagli effetti elettronici dei vicini, dal legame idrogeno



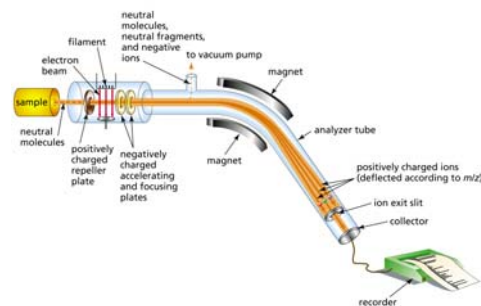
L'Informazione che si può ricavare dal uno spettro di massa

La massa molecolare

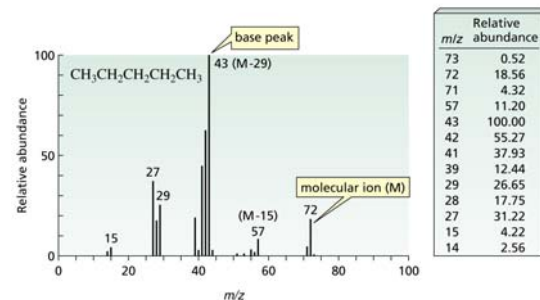
La formula molecolare

Alcune caratteristiche strutturali del composto

uno spettrometro di massa



Uno spettro di massa registra solo gli ioni positivi



m/z = rapporto massa/carica per il frammento

• massa molecolare nominale: la massa molecolare arrotondata all'intero più vicino

• ogni valore di m/z è la massa nominale del frammento

• Il picco con il valore più alto di m/z spesso rappresenta lo ione molecolare (M)

• Picchi con valore minori di m/z rappresentano frammenti della molecola dotati di carica positiva

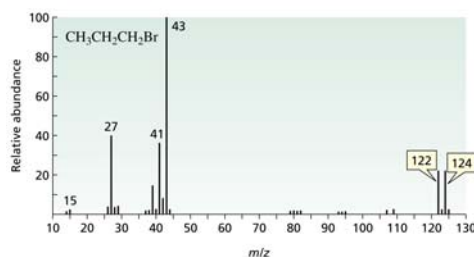
Gli isotopi negli spettri di massa

• I picchi attribuibili agli isotopi possono aiutare nell'identificazione dei composti

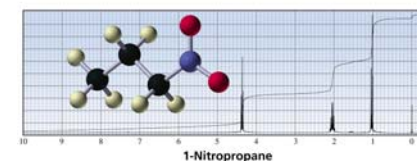
• picco $M + 2$: un contributo di ^{18}O

• un picco $M + 2$ abbondante suggerisce che il composto contiene cloro o bromo: Cl se $M + 2$ è $1/3$ dell'altezza di M; Br se $M + 2$ ha la stessa altezza di M

Bromopropano



Spettroscopia NMR

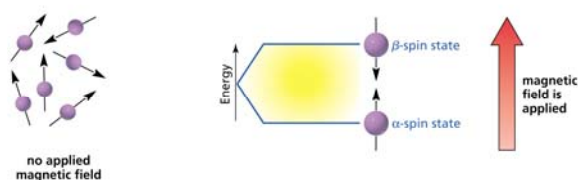


Spettroscopia di risonanza magnetica nucleare (NMR)

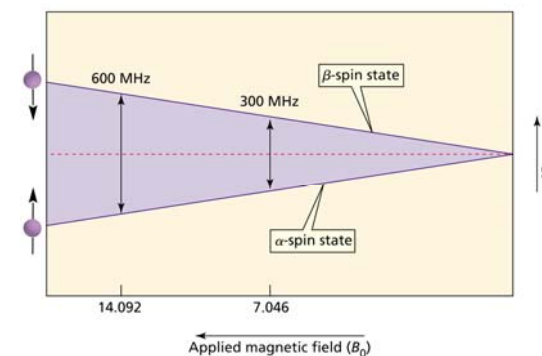
Identifica lo scheletro idrocarburico di un composto organico

Alcuni nuclei, come ^1H , ^{13}C , ^{19}F , e ^{31}P hanno stati di spin permessi di $+1/2$ e $-1/2$; questa proprietà permette di studiarli con l'NMR

Lo stato di spin di un nucleo è influenzato dal campo magnetico

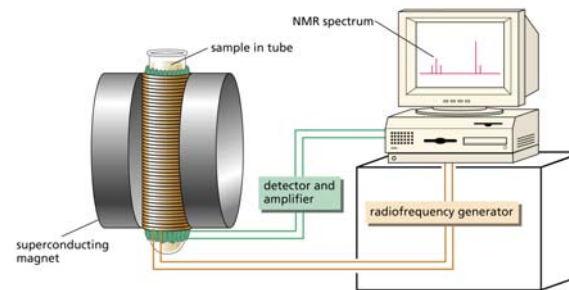


La differenza di energia di due stati di spin nucleare dipende dalla forza del campo magnetico applicato

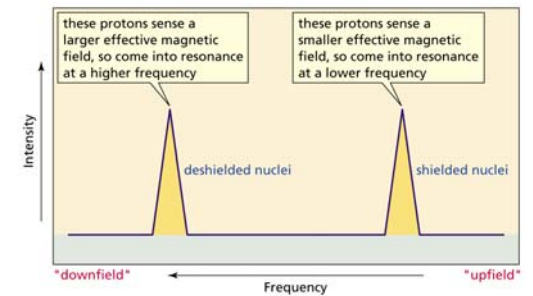


α -spin $\xrightleftharpoons[\text{rilascia } \Delta E]{\text{Assorbe } \Delta E}$ β -spin
 Segnale misurato in NMR

Uno spettrometro NMR



Gli elettroni intorno al nucleo influenzano il campo magnetico effettivo di cui il nucleo risente

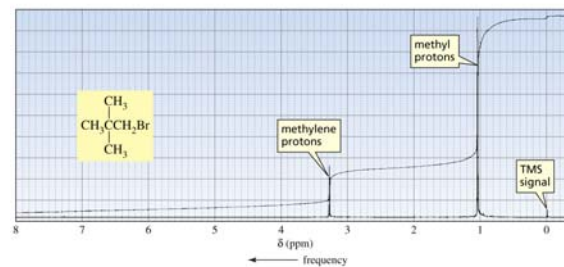


Protoni chimicamente equivalenti: sono protoni nello stesso intorno chimico

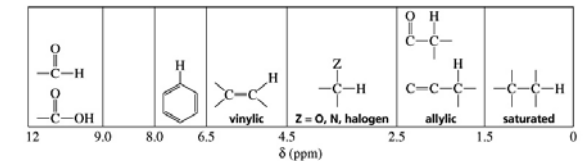
Ogni insieme di protoni chimicamente equivalenti dà un segnale unico nello spettro ^1H NMR di quel composto



^1H NMR del 1-bromo-2,2-dimetilpropano



Valori caratteristici di "chemical shift"

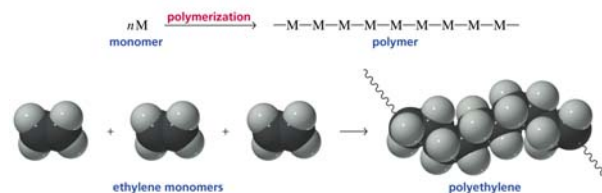


I polimeri sintetici

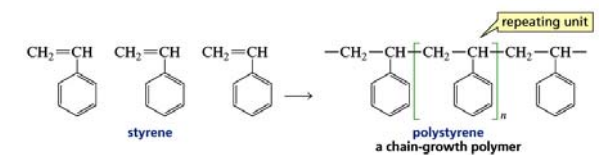


Super glue

Un polimero è una macromolecola ottenuta legando tra loro come unità ripetitive molecole piccole dette monomeri



I polimeri di addizione sono ottenuti da reazioni a catena



$$\text{CH}_3\text{O}-\text{C}(=\text{O})-\text{C}_6\text{H}_4-\text{C}(=\text{O})-\text{OCH}_3 + \text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{OH} \xrightarrow{\Delta} \left[\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{O}-\text{C}(=\text{O})-\text{C}_6\text{H}_4-\text{C}(=\text{O})-\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{O} \right]_n + 2n \text{CH}_3\text{OH}$$

dimethyl terephthalate 1,2-ethanediol poly(ethylene terephthalate)
Dacron

a step-growth polymer

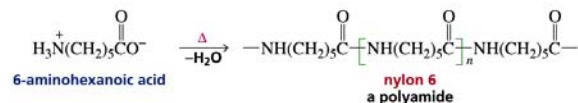
repeating unit

Quando ci sono diverse unità ripetitive si parla di copolimero

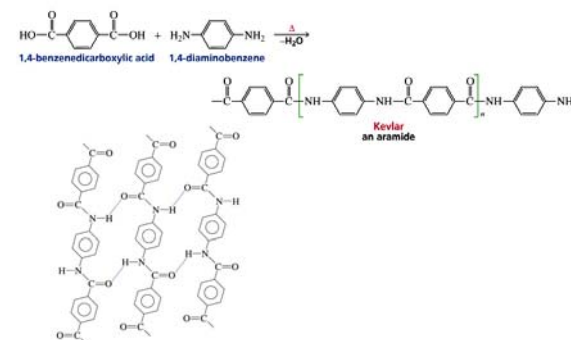
Quattro tipi generali

an alternating copolymer	A B A B A B A B A B A B A B A B A B A B A B A
a block copolymer	A A A A A B B B B B A A A A A B B B B B A A A
a random copolymer	A A B A B A B B A B A A B B B A B A B B A A A B
a graft copolymer	A A
	B B B
	B B B
	B B B
	B B B
	R R R

Il Nylon 6 è un esempio di un polimero ottenuto per condensazione di un monomero con due gruppi funzionali diversi



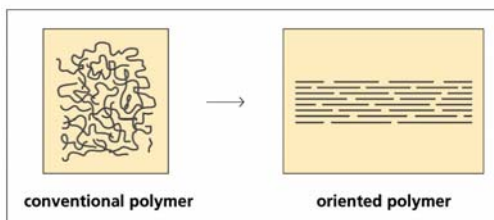
L'incorporazione di anelli aromatici migliora le caratteristiche fisiche dei polimeri



Polimeri orientati

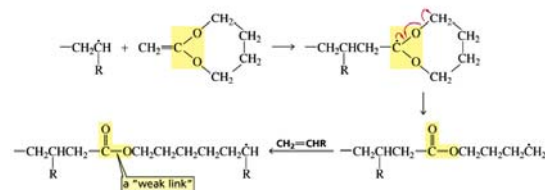
Possono essere più forti dell'acciaio

Possono condurre elettricità



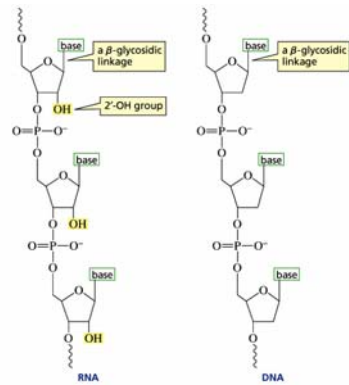
Polimeri biodegradabili

Questi polimeri possono essere rotti in unità più piccole mediante reazioni catalizzate da enzimi

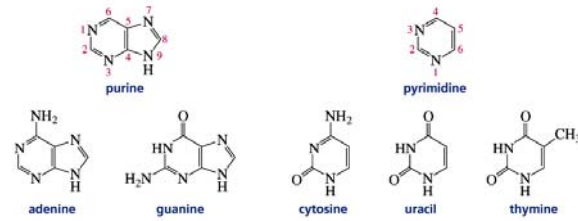


Gli acidi nucleici

Gli acidi nucleici



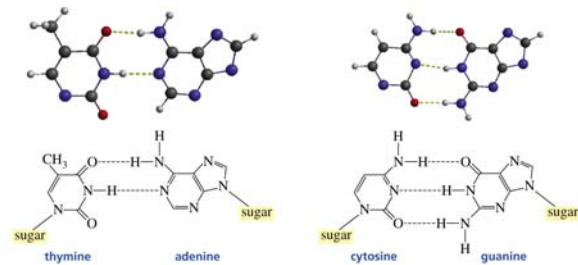
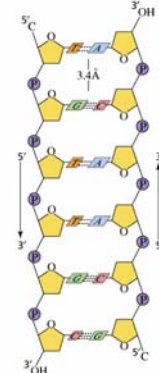
Le basi negli acidi nucleici



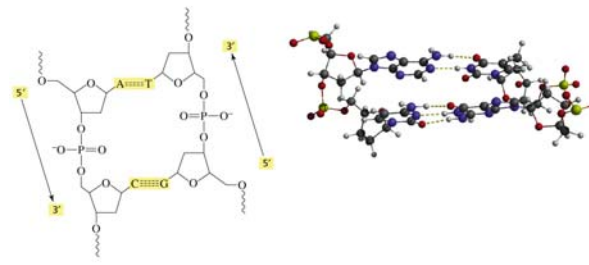
Nel DNA si trovano adenina, guanina, citosina e timina

Adenina, guanina, citosina, e uracile si trovano nell'RNA

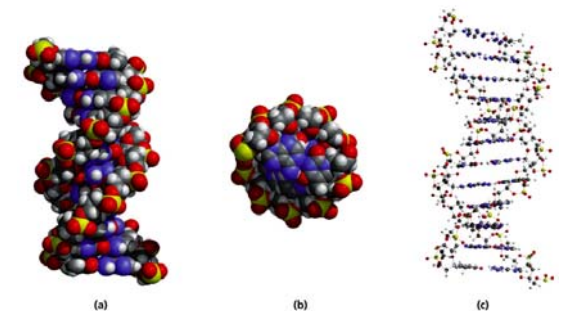
Appaiamento complementare nel DNA



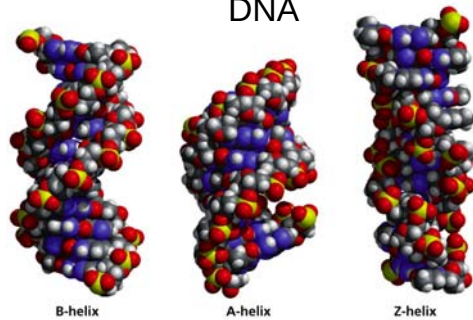
Lo scheletro zucchero-fosfato si trova all'esterno, le basi all'interno



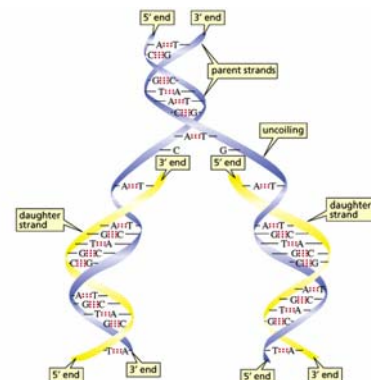
La doppia elica del DNA



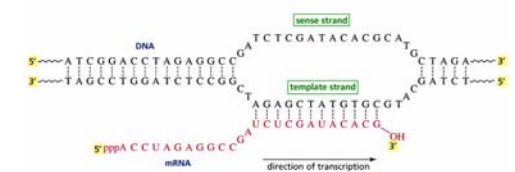
Le tre forme elicoidali canoniche del DNA

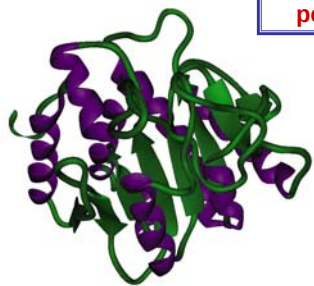


Replicazione del DNA



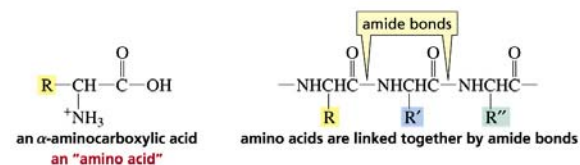
Trascrizione del DNA



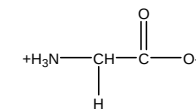


**Aminoacidi,
peptidi, proteine**

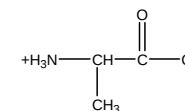
Peptidi e proteine sono polimeri degli aminoacidi, legati mediante legami ammidici



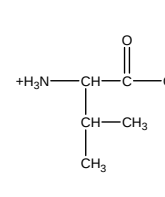
Catene laterali alifatiche



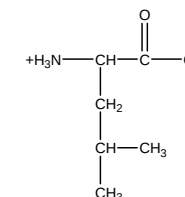
glycine



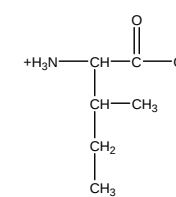
alanine



valine

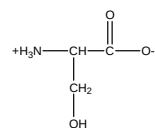


leucine

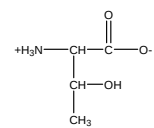


isoleucine

Aminoacidi che contengono ossidrili

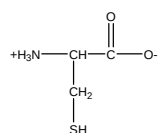


serine

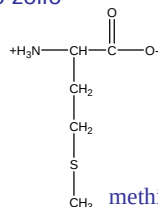


threonine

Aminoacidi che contengono lo zolfo

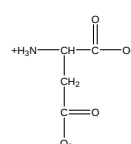


cysteine

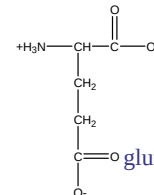


methionine

Aminoacidi acidi

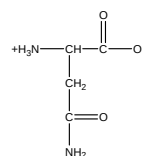


aspartic acid

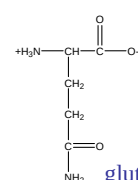


glutamic acid

Ammidi di Aminoacidi acidi

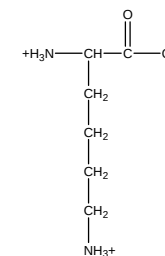


asparagine

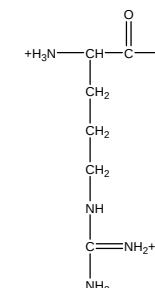


glutamine

Aminoacidi basici

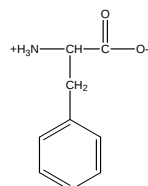


lysine

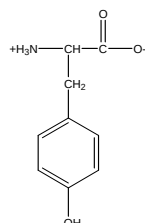


arginine

Aminoacidi che contengono il benzene

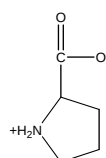


phenylalanine

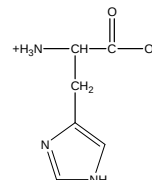


tyrosine

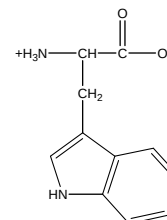
Aminoacidi che contengono eterocicli



proline



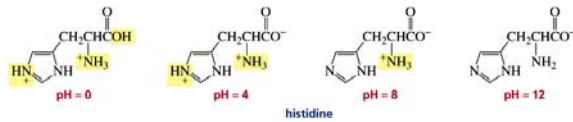
histidine



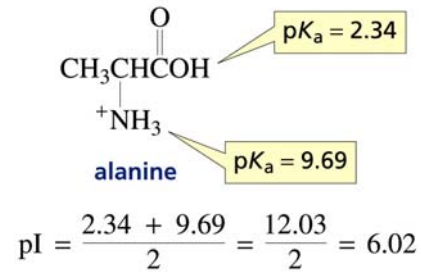
tryptophan

Amino acid	pK_a $\alpha\text{-COOH}$	pK_a $\alpha\text{-NH}_3^+$	pK_a side chain
Alanine	2.34	9.69	—
Arginine	2.17	9.04	12.48
Asparagine	2.02	8.84	—
Aspartic acid	2.09	9.82	3.86
Cysteine	1.92	10.46	8.35
Glutamic acid	2.19	9.67	4.25
Glutamine	2.17	9.13	—
Glycine	2.34	9.60	—
Histidine	1.82	9.17	6.04
Isoleucine	2.36	9.68	—
Leucine	2.36	9.60	—
Lysine	2.18	8.95	10.79
Methionine	2.28	9.21	—
Phenylalanine	2.16	9.18	—
Proline	1.99	10.60	—
Serine	2.21	9.15	—
Threonine	2.63	9.10	—
Tryptophan	2.38	9.39	—
Tyrosine	2.20	9.11	10.07
Valine	2.32	9.62	—

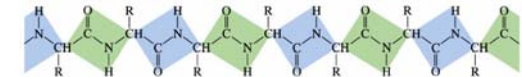
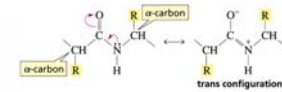
Alcune catene laterali sono ionizzabili



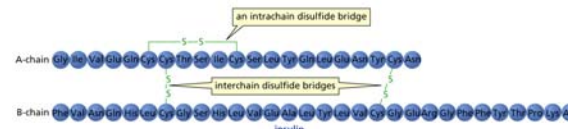
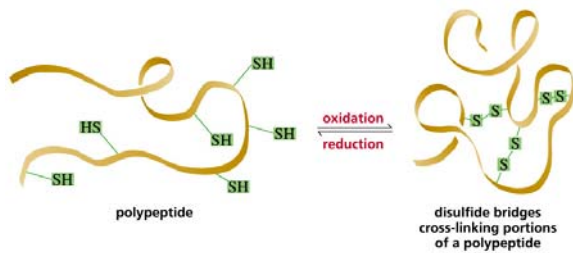
Il punto isoelettrico (pI) è il pH in cui l'amminoacido non ha carica netta



Il legame peptidico



I ponti disolfuro contribuiscono alla forma delle proteine



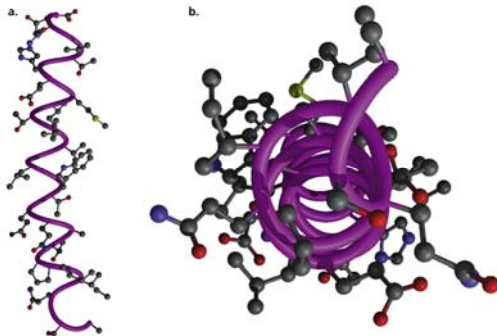
Secondary Structure of Proteins

Describe the conformation of segments of the backbone chain of a peptide or protein

Three factors determine the choice of secondary structure:

- the regional planarity about each peptide bond
- maximization of the number of peptide groups that engage in hydrogen bonding
- adequate separation between nearby R groups

La struttura secondaria delle proteine



The α -Helix Is Stabilized by Hydrogen Bonds

La struttura terziaria è la disposizione tridimensionale degli atomi in una proteina

