

Studi Orientazionali e Conformazionali mediante Spettroscopia NMR in Cristalli Liquidi (LXNMR)

Marcello Longeri, Giorgio Celebre, Giuseppina De Luca, Christie Aroulanda, Giuseppe Pileio

Laboratorio LXNMR_S.C.An. – Dip. Di Chimica – Università della Calabria – 87036 Rende (CS) – ITALY

Gli studi attualmente condotti presso il Laboratorio LXNMR_S.C.An. vertono sostanzialmente su due tematiche:

Linea 1: Studi Conformazionali di Piccole Molecole mediante LXNMR;

Linea 2: Interazioni Orientanti Soluto-Solvente in Mesofasi Uniassiali.

Linea 1: Studi Conformazionali di Piccole Molecole mediante LXNMR

Sebbene le attuali risorse strumentali e computazionali consentano ormai di affrontare studi di biomolecole, il problema dell'equilibrio conformazionale di "piccole" molecole flessibili è tutt'altro che risolto. In questo contesto la tecnica LXNMR risulta di estremo valore, soprattutto quando si provveda a marcature strategiche mediante ^{13}C o si riesca nell'impresa dell'osservazione ed interpretazione degli spettri satellite. Tuttavia la grana fine richiesta nell'interpretazione dei dati sperimentali necessita dell'adozione delle correzioni vibrazionali, da cui la problematica della scelta e dell'utilizzo di un buon Force Field per la molecola in oggetto. In questa ottica sono da inquadrare gli studi condotti sul Difenilmetano [1] e quelli ancora in corso su Stirene e Benzaldeide.

Linea 2: Interazioni Orientanti Soluto-Solvente in Mesofasi Uniassiali

Un ulteriore contributo all'annosa (quanto fondamentale) questione dell'efficace descrizione delle interazioni orientazionali a corto raggio tra un soluto-probe disciolto in una mesofase uniassiale e il mezzo circostante è stato di recente fornito [2] da un modello ove il soluto sia modellato come un semplice parallelepipedo interagente con le molecole di solvente "prime vicine" (crudamente descritte come "bacchettine") ed il solvente stesso sia caratterizzato da un direttore virtuale rispetto al quale le suddette bacchettine tendano ad allinearsi. Tale modello, per quanto semplice, ha fornito eccellenti risultati [3, 4] nella descrizione dell'orientazione di numerose molecole disciolte nelle "miscele magiche" (dove l'ordine del soluto dovrebbe ragionevolmente essere impartito in maniera sostanziale dai meccanismi a corto raggio) nonché nel caso dei cosiddetti "soluti magici" [4]. Ancor più recente è l'estensione del modello all'inclusione di effetti elettrostatici [5] ed a forme del soluto meno regolari (in progress). Incoraggianti risultati preliminari sono anche stati ottenuti nel caso di soluti prochirali quali il norbornadiene (in progress).

[1] G. Celebre, G. De Luca, J. W. Emsley, E. K. Foord, M. Longeri, F. Lucchesini and G. Pileio, *J. Chem. Phys.*, 2003, **118**, 6417.

[2] G. Celebre, *Chem. Phys. Lett.*, 2001, **342**, 375.

[3] G. Celebre, *J. Chem. Phys.*, 2001, **115**, 9552.

[4] G. Celebre and G. De Luca, *J. Phys. Chem. B*, 2003, **107**, 3243.

[5] G. Celebre and G. De Luca, *Chem. Phys. Lett.*, 2003, **368**, 359.