



## SCHEDA DELL'INSEGNAMENTO (SI)

"FONDAMENTI DI SPETTROSCOPIA MOLECOLARE"  
"FUNDAMENTALS OF MOLECULAR SPECTROSCOPY"

SSD CHIM/06

DENOMINAZIONE DEL CORSO DI STUDIO: BIOTECNOLOGIE PER LA SALUTE

ANNO ACCADEMICO 2021-2022

### INFORMAZIONI GENERALI - DOCENTE

DOCENTE: VERONICA ESPOSITO

TELEFONO: 081678746

EMAIL: verespos@unina.it

### INFORMAZIONI GENERALI - ATTIVITÀ

INSEGNAMENTO INTEGRATO (EVENTUALE):

MODULO (EVENTUALE):

CANALE (EVENTUALE):

ANNO DI CORSO (I, II, III): II

SEMESTRE (I, II): II

CFU: 5

## INSEGNAMENTI PROPEDEUTICI (se previsti dall'Ordinamento del CdS)

---

### EVENTUALI PREREQUISITI

---

---

### OBIETTIVI FORMATIVI

Gli obiettivi formativi indicano il profilo formativo generale dell'insegnamento e la sua relazione con il CdS.

#### Esempi:

"Obiettivo dell'insegnamento è quello di introdurre il tema del..."; "L'insegnamento si propone di fornire agli studenti le nozioni di base /specialistiche di..."

Per gli insegnamenti di primo livello utilizzare i sintagmi "di base, ....";

Per gli insegnamenti di secondo livello utilizzare i sintagmi "specialistico/approfondito..."

### RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI (DESCRITTORI DI DUBLINO)

L'obiettivo del corso è di fornire allo studente una conoscenza di base delle principali tecniche spettroscopiche moderne per la identificazione e la caratterizzazione di molecole organiche di piccole e medie dimensioni (farmaci) e dei biopolimeri. Il corso introdurrà gli studenti ai principi e agli approcci sperimentali, in rapida evoluzione delle varie tecniche spettroscopiche delle molecole di interesse farmacologico e biotecnologico. In particolare, verranno illustrate le tecniche di assorbimento Uv-vis, IR, spettrometria di massa e spettroscopia NMR. Per ogni argomento proposto verrà fornita la base teorica sul principio di funzionamento e verranno presentate e discusse numerose applicazioni mediante anche la risoluzione di esercizi. Al termine del corso lo studente sarà in grado di 1) identificare la struttura di un composto incognito basandosi sull'analisi combinata di spettri Uv-vis, IR, di massa ed NMR 2) comprendere recenti pubblicazioni scientifiche in questo campo 3) approfondire autonomamente i temi di suo interesse.

#### **Conoscenza e capacità di comprensione**

Lo studente deve dimostrare di conoscere i principi che stanno alla base delle tecniche spettroscopiche presentate nel corso ed essere in grado di comprenderne le potenzialità ed il loro utilizzo per lo studio di molecole di interesse farmacologico e biotecnologico mediante un apprendimento critico e non mnemonico, utilizzando un approccio metodologico scientifico da applicare al successivo studio nell'ambito delle biotecnologie farmaceutiche.

#### **Capacità di applicare conoscenza e comprensione**

Lo studente partendo dagli esempi discussi durante il corso deve dimostrare di avere una comprensione degli approcci teorico-sperimentali al fine di scegliere la tecnica spettroscopica più adatta per risolvere il problema di interesse, progettando l'esperimento ed analizzando in maniera critica i risultati ottenuti.

### PROGRAMMA-SYLLABUS

Introduzione al corso: metodi chimico-fisici di individuazione e caratterizzazione delle sostanze organiche e metodi spettroscopici. Generalità e principi della spettroscopia molecolare. (0.5CFU) Spettroscopia infrarossa: aspetti teorici e pratici. Modello dell'oscillatore armonico. Assorbimento dei principali gruppi funzionali. (1CFU) Spettroscopia ultravioletta: aspetti teorici e pratici. Transizioni elettroniche. Cromofori. (1CFU) Spettrometria di massa: aspetti teorici e pratici. Determinazione del peso molecolare, principali frammentazioni. Impatto elettronico. Tecniche alternative di ionizzazione: ionizzazione chimica, FAB, electrospray, MALDI. Analizzatori a quadrupolo, TOF, a trappola ionica. (1CFU) Spettroscopia di risonanza magnetica nucleare: aspetti teorici e pratici. Spin nucleare. Risonanza del protone, spostamenti chimici ed accoppiamenti spin-spin, disaccoppiamento di spin. Effetto nucleare Overhauser. Semplici sistemi di spin. Simmetria molecolare ed NMR. Equivalenza di chemical shift ed equivalenza magnetica. Sensibilità dell'esperimento NMR. Spettroscopia NMR in trasformata di Fourier. Risonanza del  $^{13}\text{C}$  e spostamenti chimici. Spettroscopia NMR bidimensionale. Interpretazione degli spettri bidimensionali. Principali esperimenti bidimensionali: COSY, NOESY, TOCSY, HMQC, HMBC. Riconoscimento di una sostanza organica dall'analisi delle proprietà spettroscopiche. (1.5CFU)

Chemical and Physical methods for the identification and characterization of organic substances. Spectroscopic methods: general. Infrared spectroscopy: theoretical and practical aspects. Harmonic oscillator model. Absorption of the main functional groups. Ultraviolet Spectroscopy: theoretical and practical aspects. Electronic transitions. Chromophores. Mass

spectrometry: theoretical and practical aspects, determination of molecular weight and main fragmentations. Electronic Impact. Alternative methods of ionization: chemical ionization, FAB, electrospray, MALDI. Analyzers: quadrupole, TOF, ion trap. Nuclear magnetic resonance spectroscopy: theoretical and practical aspects. Nuclear spin. Resonance of the proton chemical shifts and spin-spin coupling, decoupling of spin. Nuclear Overhauser Effect. Simple spin systems. Molecular symmetry and NMR. Chemical shift equivalence. Sensitivity of NMR experiments. NMR spectroscopy in Fourier transform. <sup>13</sup>C NMR chemical shifts. Two-dimensional NMR spectroscopy. Interpretation of two-dimensional spectra. Main two-dimensional experiments: COSY, NOESY, TOCSY, HMQC, HMBC. Recognition of an organic substance from the analysis of the spectroscopic properties.

## MATERIALE DIDATTICO

*Diapositive delle lezioni e video Jove.*

## MODALITÀ DI SVOLGIMENTO DELL'INSEGNAMENTO

*Descrivere le modalità in cui verrà erogata la didattica: lezioni frontali, esercitazioni, laboratorio, tirocinio o stage seminari, altro.*

*Eventualmente indicare anche la strumentazione adottata (lezioni registrate, supporti multimediali, software specialistico, materiale on line ecc.).*

## VERIFICA DI APPRENDIMENTO E CRITERI DI VALUTAZIONE

### a) Modalità di esame:

L'esame si articola in prova	
scritta e orale	
solo scritta	
solo orale	X
discussione di elaborato progettuale	
altro	

In caso di prova scritta i quesiti sono (*)	A risposta multipla	
	A risposta libera	
	Esercizi numerici	

(\*) È possibile rispondere a più opzioni

### b) Modalità di valutazione:

[questo campo va compilato solo quando ci sono pesi diversi tra scritto e orale o tra moduli se si tratta di insegnamenti integrati]