

Testi del Syllabus

Resp. Did.	ROMEO ROBERTO	Matricola: 004814
Docente	ROMEO ROBERTO, 7 CFU	
Anno offerta:	2026/2027	
Insegnamento:	4336 - METODI FISICI IN CHIMICA ORGANICA	
Corso di studio:	7026 - CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE	
Anno regolamento:	2024	
CFU:	7	
Anno corso:	3	
Periodo:	SECONDO SEMESTRE	



Testi in italiano

Lingua insegnamento	ITALIANO
Contenuti	PRINCIPI GENERALI Il principio della quantizzazione dell'energia - Proprietà di una radiazione elettromagnetica - Interazioni tra materia e radiazione nelle varie tecniche spettroscopiche - Spettri di emissione e di assorbimento- Cenni sulla spettroscopia atomica Spettroscopia ultravioletto Molecole biatomiche Molecole poliatomiche. Transizioni elettroniche Fluorescenza e fosforescenza. Strumentazione Principi teorici Applicazioni Spettroscopia rotazionale Spettroscopia raman Strumentazione Lo spettro Raman Spettroscopia infrarosso Principi generali Caratteristiche generali di uno spettro IR Strumentazione Spettrofotometro IR Preparazione del campione Analisi sistematica dei gruppi funzionali Risonanza magnetica elettronica Principi generali Strumentazione Accoppiamento iperfine Spettro EPR dell'atomo di idrogeno Accoppiamenti con altri nuclei Righe dello spettro EPR Le spin traps Risonanza magnetica nucleare . NMR del protone Cenni storici Lo spin nucleare Energia dei nuclei in un campo magnetico Popolazione dei livelli energetici e magnetizzazione macroscopica Condizione di risonanza Regole di selezione Strumentazione e descrizione dell'esperimento NMR NMR CW NMR a impulsi Chemical Shift Fattori che influenzano il Chemical Shift Integrazione Accoppiamento spin spin Sistemi di spin Equivalenza chimica e magnetica. Simmetria e chiralità Sistemi di ordine superiore Costanti di accoppiamento Tecniche multi pulso Disaccoppiamento di spin Disaccoppiamento Tempo di rilassamento T1 e T2 Esperimenti multi pulso Sequenze di impulsi e gradiente APT (spin echo J-modulated) Risonanza magnetica nucleare .NMR bidimensionale COSY TOCSY 2D HETCOR Tecniche inverse (HSQC, HMQC, HMBC) Tecniche bidimensionali di scambio: NOESY, EXSY e ROESY ADEQUATE E INADEQUATE 2D Spettrometria di massa Principi fondamentali Ionizzazione

Impatto elettronico Ionizzazione chimica Ionizzazione elettrospray
Ionizzazione chimica a pressione atmosferica
FAB e SIMS Maldi Field desorption e field ionization PDMS Analizzatori
Rivelatori Spettri ad alta risoluzione

Testi di riferimento

Spettroscopia in Chimica Organica, R.Romeo, Piccin, In Press.
Basic one-and twodimensional NMR spectroscopy . H. Friebolin VCH New York
Spectrometric Identification of Organic Compounds. R.M. Silverstein, G.C. Bassler e T.C. Morrill; John Wiley & Son, Inc.
Spectroscopic Methods in Organic Chemistry. D.H.Williams e I. Fleming; McGraw-Hill Book Company
Introduction to Spectroscopy. D.L. Pavia, G.M. Lampman e G.S. Kriz; Saunders Golden Sunburst Series

Obiettivi formativi

L'insegnamento si propone di fornire allo studente le conoscenze teoriche e applicative relative alle principali tecniche spettroscopiche e spettrometriche utilizzate per la caratterizzazione strutturale dei composti organici, con particolare riferimento all'interpretazione integrata dei dati analitici

Conoscenza e capacità di comprensione

Al termine dell'insegnamento lo studente dovrà:

- conoscere i principi teorici alla base delle principali tecniche spettroscopiche e spettrometriche applicate alla chimica organica;

-

- comprendere le correlazioni tra struttura molecolare e dati spettroscopici;

-

- comprendere le metodologie utilizzate per l'identificazione e la caratterizzazione strutturale dei composti organici;

-

- comprendere le informazioni ottenute mediante differenti tecniche analitiche.

Capacità di applicare conoscenza e comprensione

Al termine dell'insegnamento lo studente sarà in grado di:

- applicare le principali tecniche spettroscopiche e spettrometriche alla determinazione strutturale di molecole organiche;

- interpretare dati spettroscopici complessi derivanti da tecniche integrate;

- utilizzare le informazioni analitiche per risolvere problemi di identificazione strutturale in ambito chimico-organico.

Prerequisiti

Lo studente deve possedere conoscenze di chimica organica.
Propedeuticità: Chimica organica I.

Metodi didattici

L'insegnamento è articolato in lezioni frontali e attività di analisi guidata di spettri, finalizzate all'acquisizione delle competenze necessarie per la determinazione strutturale di composti organici mediante l'impiego integrato delle principali tecniche spettroscopiche. L'attività didattica è supportata da presentazioni multimediali, PC e videoproiettore.

La frequenza alle attività didattiche è obbligatoria. Sono consentite assenze per non più del 50% delle ore complessivamente previste per l'insegnamento. L'assolvimento dell'obbligo di frequenza costituisce requisito per l'ammissione all'esame di profitto. La frequenza è accertata mediante il sistema informatico di rilevazione delle presenze adottato dall'Ateneo.

Altre informazioni

Obiettivi di Sviluppo Sostenibile (Agenda ONU 2030)

L'insegnamento contribuisce al raggiungimento dei seguenti Obiettivi di Sviluppo Sostenibile (SDGs) dell'Agenda ONU 2030:

- SDG 4 - Istruzione di qualità, promuovendo l'acquisizione di conoscenze avanzate e competenze analitiche per l'interpretazione dei dati spettroscopici e la determinazione strutturale di composti organici.

- SDG 3 - Salute e benessere, attraverso la formazione di competenze fondamentali per la ricerca farmaceutica, lo sviluppo di nuovi principi attivi e il controllo della qualità dei medicinali.

- SDG 9 - Imprese, innovazione e infrastrutture, favorendo l'utilizzo di metodologie strumentali innovative e tecnologie analitiche avanzate impiegate nella ricerca scientifica e nell'industria chimico-farmaceutica.

Modalità di verifica dell'apprendimento

L'apprendimento sarà verificato mediante una prova orale finalizzata ad accertare il raggiungimento degli obiettivi formativi dell'insegnamento. La prova prevede l'interpretazione di spettri ottenuti mediante le principali tecniche spettroscopiche (UV-Vis, IR, NMR e spettrometria di massa), l'identificazione e la determinazione strutturale di composti organici, nonché quesiti teorici sui principi fisici, sul funzionamento e sulle applicazioni delle metodiche spettroscopiche. La valutazione terrà conto della correttezza delle conoscenze acquisite, della capacità di interpretare criticamente i dati sperimentali, di integrare le informazioni provenienti da diverse tecniche spettroscopiche, della proprietà di linguaggio e della chiarezza espositiva.

Obiettivi per lo sviluppo sostenibile

Codice	Descrizione
--------	-------------



Testi in inglese

	Italian
	Quantization of Energy Ultraviolet spectroscopy Diatomic molecules Polyatomic molecules. Electronic transitions Fluorescence and phosphorescence. Instrumentation Theoretical principles Applications Rotational spectroscopy Raman spectroscopy Instrumentation The Raman spectrum Infrared spectroscopy General principles General characteristics of an IR spectrum Instrumentation IR spectrophotometer Sample preparation Systematic analysis of functional groups Electron magnetic resonance General principles Instrumentation Hyperfine coupling EPR spectrum of the hydrogen atom Couplings with other nuclei Lines of the EPR spectrum. Spin traps Nuclear Magnetic Resonance. NMR of the proton Historical notes Nuclear spin Energy of nuclei in a magnetic field Population of energy levels and macroscopic magnetization Resonance condition Selection rules Instrumentation and description of the NMR CW NMR pulse NMR experiment Chemical Shift Factors influencing the Chemical Shift Integration Spin spin coupling. Spin systems. Chemical and magnetic equivalence. Symmetry and chirality Higher order systems Coupling constants Multi-pulse techniques Spin decoupling Decoupling Relaxation time T1 and T2 Multi-pulse experiments Pulse and gradient sequences APT (J-modulated spin echo) Nuclear magnetic resonance .NMR two-dimensional COZY TOCSY 2D HETCOR Inverse techniques (HSQC, HMQC, HMBC) Two-dimensional exchange techniques: NOESY, EXSY and ROESY ADEQUATE AND INADEQUATE 2D Mass Spectrometry Fundamentals Ionization Electron impact Chemical ionization Electrospray ionization Chemical ionization at atmospheric pressure FAB and SIMS Maldi Field desorption and field ionization PDMS Analyzers Detectors High resolution spectra
	Spettroscopia in Chimica Organica, R.Romeo, Piccin, In Press. Basic one-and twodimensional NMR spectroscopy . H. Friebolin VCH New York

Spectrometric Identification of Organic Compounds. R.M. Silverstein, G.C. Bassler e T.C. Morrill; John Wiley & Son, Inc.
Spectroscopic Methods in Organic Chemistry. D.H.Williams e I. Fleming; McGraw-Hill Book Company
Introduction to Spectroscopy. D.L. Pavia, G.M. Lampman e G.S. Kriz; Saunders Golden Sunburst Series

The course aims to provide students with the theoretical and practical knowledge of the main spectroscopic and spectrometric techniques used for the structural characterization of organic compounds, with particular emphasis on the integrated interpretation of analytical data.

Knowledge and understanding

At the end of the course, the student will be expected to:

- know the theoretical principles underlying the main spectroscopic and spectrometric techniques applied to organic chemistry;
- understand the correlations between molecular structure and spectroscopic data;
- understand the methodologies used for the identification and structural characterization of organic compounds;
- understand the information obtained through different analytical techniques.

Applying knowledge and understanding

At the end of the course, the student will be able to:

- apply the main spectroscopic and spectrometric techniques to the structural determination of organic molecules;
- interpret complex spectroscopic data obtained from integrated analytical techniques;
- use analytical information to solve structural identification problems in the field of organic chemistry.

The student must have knowledge of organic chemistry.

Required exams: Organic chemistry I.

The course consists of face-to-face lectures covering the theoretical principles and applications of the main spectroscopic techniques employed in the structural elucidation of organic compounds. Guided interpretation of spectroscopic data and representative case studies will be discussed to develop students' analytical and problem-solving skills. Teaching activities are supported by multimedia presentations, a personal computer, and a video projector.

Attendance at all teaching activities is mandatory. Absences are permitted for no more than 50% of the total hours scheduled for the course. Fulfilment of the attendance requirement is a prerequisite for admission to the final examination. Attendance is monitored through the electronic attendance tracking system adopted by the University.

Sustainable Development Goals (UN 2030 Agenda)

This course contributes to the achievement of the following United Nations Sustainable Development Goals (SDGs):

- SDG 4 - Quality Education, by providing advanced knowledge and analytical skills for the interpretation of spectroscopic data and the structural elucidation of organic compounds.
- SDG 3 - Good Health and Well-being, by developing competencies that are essential for pharmaceutical research, drug discovery, and quality control of medicinal products.
- SDG 9 - Industry, Innovation and Infrastructure, by promoting the use of advanced analytical techniques and instrumental methodologies widely employed in scientific research and the chemical and pharmaceutical industries.

Learning will be assessed through an oral exam designed to ensure achievement of the course's learning objectives. The exam includes the interpretation of spectra obtained using the main spectroscopic techniques (UV-Vis, IR, NMR, and mass spectrometry), the identification and structural determination of organic compounds, as well as theoretical questions on the physical principles, operation, and applications of spectroscopic methods. Assessment will take into account the accuracy of the knowledge acquired, the ability to critically interpret experimental data, the ability to integrate information from different spectroscopic

techniques, the correct use of language, and the clarity of presentation.

Obiettivi per lo sviluppo sostenibile

Codice	Descrizione
--------	-------------