

DENOMINAZIONE INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

SPETTROSCOPIA NMR E SPETTROMETRIA DI MASSA: APPLICAZIONI E LABORATORIO

NMR SPECTROSCOPY AND MASS SPECTROMETRY: APPLICATIONS AND LABORATORY

INFORMAZIONI INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

A.A.	2026-2027	CdS	CHIMICA
Codice	8068232	Canale	Unico
CFU	6	Lingua	Italiano

DOCENTE RESPONSABILE DELL'INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

DANIEL OSCAR CICERO

CODOCENTE

GRETA PETRELLA

Lezioni frontali e esercitazione di laboratorio

OBIETTIVI FORMATIVI E RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano	<p>OBIETTIVI FORMATIVI:</p> <p>Fornire allo studente gli strumenti teorici e pratici per l'utilizzo delle tecniche di spettroscopia NMR e di spettrometria di massa (MS) nell'identificazione e nella caratterizzazione di molecole organiche e biomolecole, con particolare attenzione alle applicazioni analitiche e strutturali in ambito chimico, biologico e farmaceutico.</p> <p>CONOSCENZA E CAPACITÀ DI COMPrensIONE:</p> <p>Lo studente, alla fine del corso, possiede una solida conoscenza dei principi fondamentali della spettroscopia NMR monodimensionale, bidimensionale e tridimensionale, e della spettrometria di massa, inclusi i metodi di ionizzazione, separazione e rilevazione. Sarà inoltre in grado di comprendere il funzionamento degli strumenti e di interpretare i dati sperimentali.</p> <p>CAPACITÀ DI APPLICARE CONOSCENZA E COMPrensIONE:</p> <p>Lo studente dovrà essere in grado di interpretare e analizzare spettri NMR e dati MS per determinare la struttura di composti organici, biomolecole e miscele complesse. Sarà inoltre in grado di progettare esperimenti di NMR (ad es. COSY, TOCSY, HSQC, NOESY) e di comprendere i parametri fondamentali della spettrometria di massa per applicazioni di proteomica e metabolomica.</p>
-----------------	---

	<p>AUTONOMIA DI GIUDIZIO: Lo studente acquisirà autonomia nel valutare e confrontare dati spettroscopici e spettrometrici, nel riconoscere segnali ambigui o artefatti e nel trarre conclusioni affidabili sulla struttura e sull'identità dei composti analizzati.</p> <p>ABILITÀ COMUNICATIVE: Lo studente sarà in grado di comunicare in modo chiaro e appropriato i concetti fondamentali della spettroscopia NMR e della spettrometria di massa, sia in ambito accademico sia in quello applicato, utilizzando terminologia tecnica corretta e illustrando con chiarezza le metodologie e i risultati sperimentali.</p> <p>CAPACITÀ DI APPRENDIMENTO: Lo studente svilupperà la capacità di approfondire autonomamente le tematiche trattate, consultando articoli scientifici e manuali avanzati, e sarà in grado di integrare le conoscenze teoriche con l'esperienza pratica acquisita in laboratorio, ponendo le basi per ulteriori percorsi di studio o per l'inserimento in attività di ricerca.</p>
<p><i>English</i></p>	<p>LEARNING OBJECTIVES: To provide students with both theoretical and practical tools for applying NMR spectroscopy and mass spectrometry (MS) to the identification and structural characterization of organic and biomolecules, with particular focus on analytical and structural applications in chemistry, biology, and pharmaceutical sciences.</p> <p>KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING: By the end of the course, the student will have acquired a solid understanding of the fundamental principles of one-dimensional, two-dimensional, and three-dimensional NMR spectroscopy, as well as mass spectrometry, including ionization, separation, and detection methods. The student will also be able to understand instrument operation and interpret experimental data.</p> <p>APPLYING KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING: The student will be able to interpret and analyze NMR spectra and MS data to determine the structures of organic compounds, biomolecules, and complex mixtures. They will also be capable of designing NMR experiments (e.g., COSY, TOCSY, HSQC, NOESY) and understanding the key parameters in mass spectrometry for proteomics and metabolomics applications.</p> <p>INDEPENDENT JUDGEMENT: The student will gain the ability to critically evaluate spectroscopic and spectrometric data, recognize ambiguous signals or artifacts, and draw reliable conclusions about the structure and identity of the analyzed compounds.</p>

	<p>COMMUNICATION SKILLS:</p> <p>The student will be able to clearly and appropriately communicate fundamental concepts in NMR spectroscopy and mass spectrometry, both in academic and applied settings, using accurate technical terminology and effectively presenting methodologies and experimental results.</p> <p>LEARNING SKILLS:</p> <p>The student will develop the ability to autonomously deepen the topics covered, consulting scientific literature and advanced textbooks, and will be able to integrate theoretical knowledge with practical experience gained in the laboratory, laying the groundwork for further study or research activities.</p>
--	--

PREREQUISITI

Italiano	Conoscenza di base di chimica organica, di NMR e di LC-MS.
<i>English</i>	Basic knowledge of organic chemistry, NMR, and LC-MS.

PROGRAMMA E CRONOPROGRAMMA

Italiano	<p>Modulo di Risonanza Magnetica Nucleare (NMR)</p> <p>Introduzione alla spettroscopia NMR</p> <p>Esperimenti monodimensionali: ^1H, ^{13}C, tecniche di editing e soppressione del segnale dell'acqua</p> <p>Spettroscopia bidimensionale: COSY, TOCSY, HSQC, HMBC</p> <p>Esperimenti NOESY e ROESY: trasferimenti attraverso lo spazio (through-space)</p> <p>Studio della dinamica molecolare mediante NMR</p> <p>Interazioni molecolari e variazioni di chemical shift indotte dal legame con ligandi</p> <p>Esperimenti tridimensionali per proteine: HNCA, HNCACB, CBCA(CO)NH, assegnamento spettrale e determinazione strutturale</p> <p>Determinazione strutturale mediante NMR: distanze NOE, angoli diedri e accoppiamenti dipolari residui (RDCs)</p> <p>Metabolomica NMR: approcci di fingerprinting e profiling</p> <p>Laboratorio: introduzione alla strumentazione e analisi di campioni reali per finalità quantitative e di elucidazione strutturale</p> <p>Modulo di spettrometria di massa (MS)</p> <p>Fondamenti della spettrometria di massa: ionizzazione, analizzatori e rivelatori</p> <p>Spettrometria di massa applicata alla proteomica: approccio bottom-up, digestione enzimatica e analisi MS/MS</p> <p>Analisi LC-MS in bioanalisi: selettività, sensibilità e procedure di calibrazione</p> <p>Applicazioni cliniche e farmacologiche: biomarcatori, metaboliti e screening analitico</p>
-----------------	---

	<p>Tecniche di quantificazione assoluta e relativa</p> <p>Laboratorio: utilizzo pratico della spettrometria di massa per identificazione e quantificazione di analiti</p>
<i>English</i>	<p>NMR Module</p> <p>Introduction to NMR spectroscopy</p> <p>One-dimensional experiments: ^1H, ^{13}C, editing, water signal suppression</p> <p>Two-dimensional spectroscopy: COSY, TOCSY, HSQC, HMBC</p> <p>NOESY and ROESY experiments: through-space transfers</p> <p>Molecular dynamics studied by NMR</p> <p>Molecular interactions and ligand-induced chemical shift changes</p> <p>Three-dimensional experiments for proteins: HNCA, HNCACB, CBCA(CO)NH, assignment, and structure</p> <p>Structure determination by NMR: NOE distances, dihedral angles, residual dipolar couplings (RDCs)</p> <p>NMR metabolomics: fingerprinting and profiling approaches</p> <p>Laboratory: introduction to instruments and analysis of real samples for quantitative and structural elucidation purposes</p> <p>Mass Spectrometry Module</p> <p>Fundamentals of mass spectrometry: ionization, analyzers, detectors</p> <p>Mass spectrometry in proteomics: bottom-up approach, digestion, MS/MS</p> <p>LC-MS analysis in bioanalysis: selectivity, sensitivity, calibration</p> <p>Clinical and pharmacological applications: biomarkers, metabolites, screening</p> <p>Techniques for absolute and relative quantification</p> <p>Laboratory: practical use of MS for identification and quantification</p>

TESTI ADOTTATI E BIBLIOGRAFIA DI RIFERIMENTO

Italiano	Articoli scientifici recenti su tematiche specifiche trattate durante il corso.
<i>English</i>	Updated articles on specific topics

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ DI SVOLGIMENTO E METODI DIDATTICI ADOTTATI

In presenza

A distanza

Italiano	Le lezioni teoriche si svolgono in aula utilizzando strumenti informatici.
<i>English</i>	Theoretical lessons are proposed in the class using informatic media

MODALITÀ DI FREQUENZA

frequenza obbligatoria frequenza facoltativa

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ DI FREQUENZA

Italiano	La frequenza alle lezioni è fortemente raccomandata. La frequenza alle lezioni è fortemente raccomandata, ma non verrà stabilita una soglia minima.
<i>English</i>	Attendance at lectures is strongly recommended, but no minimum attendance requirement will be enforced.

MODALITÀ DI VALUTAZIONE

Prova scritta Prova orale Prova di laboratorio Prova pratica
 Valutazione in itinere Valutazione di progetto Valutazione di tirocinio

COMPOSIZIONE DELLA COMMISSIONE VALUTATRICE

Daniel Oscar Cicero, Greta Petrella

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ E DEI CRITERI DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano	<p>L'esame consiste in una prova orale, preceduta dalla consegna di una relazione di laboratorio. La partecipazione alle attività di laboratorio e la consegna della relazione sono requisiti obbligatori per l'ammissione all'esame orale.</p> <p>La valutazione finale sarà attribuita secondo i seguenti criteri di accertamento dell'apprendimento:</p> <p>18–21: lo studente ha acquisito i concetti fondamentali della disciplina e dimostra una capacità espositiva sufficientemente corretta, utilizzando un linguaggio appropriato, seppur essenziale.</p> <p>22–25: lo studente ha acquisito in modo soddisfacente i concetti fondamentali della disciplina ed è in grado di stabilire collegamenti adeguati tra i diversi argomenti trattati. L'esposizione risulta lineare e coerente, con un linguaggio corretto e appropriato.</p> <p>26–29: lo studente possiede una preparazione completa e ben strutturata. Dimostra capacità logico-analitiche, buona autonomia nell'applicazione delle conoscenze acquisite e capacità di rielaborazione critica dei contenuti senza errori significativi. L'esposizione è fluida, precisa e supportata da un linguaggio adeguato e articolato.</p> <p>30–30 e lode: lo studente possiede una preparazione ampia, approfondita e pienamente consolidata. Si esprime con padronanza terminologica, chiarezza e rigore scientifico. È in grado di applicare le conoscenze acquisite alla risoluzione di problematiche complesse, estendendole autonomamente a contesti nuovi, dimostrando maturità critica e aggiornamento culturale.</p>
<i>English</i>	The exam will consist of an oral assessment, preceded by the submission of a laboratory report. Participation in the laboratory sessions and submission of the report are mandatory prerequisites for admission to the oral exam.

The final grade will be determined by the following criteria for verifying learning:

18-21, the student has acquired the basic concepts of the discipline, and a sufficiently correct and appropriate manner of expression and language.

22-25, the student has thoroughly acquired the basic concepts of the discipline and is adequately able to make connections between the various subjects. He/she presents linearity in structuring speech. Language is appropriate and correct.

26-29, the student possesses a complete and well-structured body of knowledge. He/she demonstrates a wealth of references and logical-analytical skills, using fluid, appropriate, and varied language. The student can independently apply and revise the acquired knowledge without error.

30 and 30 cum laude, the student possesses a comprehensive body of knowledge. He expresses himself with brilliance and perfect command of language. Can apply knowledge to complex cases and problems, extending it to new situations. Cultural references are rich and up-to-date.