

DENOMINAZIONE INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

CHIMICA ORGANICA III

ORGANIC CHEMISTRY III

INFORMAZIONI INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

A.A.	2026-2027	CdS	CHIMICA
Codice	8065577	Canale	Unico
CFU	6	Lingua	Italiano

DOCENTE RESPONSABILE DELL'INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

DANIEL OSCAR CICERO

OBIETTIVI FORMATIVI E RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano	OBIETTIVI FORMATIVI Determinazione della struttura delle molecole organiche utilizzando spettroscopia NMR e spettrometria di massa CONOSCENZA E CAPACITÀ DI COMPRENSIONE Lo studente alla fine del corso avrà ottenuto un bagaglio di conoscenze di base sull'uso delle tecniche spettroscopiche per la determinazione della struttura delle molecole CAPACITÀ DI APPLICARE CONOSCENZA E COMPRENSIONE Lo studente dovrà essere in grado di interpretare spettri di NMR e MS per determinare la struttura di molecole organiche. Inoltre, potrà comprendere come condurre esperimenti di NMR in modo pratico. AUTONOMIA DI GIUDIZIO Autonoma capacità di giudizio per l'interpretazione di dati spettroscopici ABILITÀ COMUNICATIVE Alla fine del corso, lo studente sarà in grado di comunicare a terzi concetti di base della spettroscopia NMR e MS degli elementi, con proprietà linguistiche e in modo propositivo. CAPACITÀ DI APPRENDIMENTO Lo studente, alla fine del corso, avrà ampliato il proprio bagaglio culturale e le proprie capacità di apprendimento e di lavoro autonomo.
<i>English</i>	LEARNING OUTCOMES

	Structure determination of organic molecules using NMR spectroscopy and Mass spectrometry KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING The student at the end of the course will acquire a set of basic knowledge about the use of NMR spectroscopy and Mass spectrometry, useful for the structure determination of organic molecules APPLYING KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING The student will be capable of interpreting NMR and MS spectra for the structure determination of organic molecules. In addition, will be capable of interpreting and setting up NMR experiments. MAKING JUDGEMENTS Autonomous judgment in the interpretation of spectroscopic data COMMUNICATION SKILLS At the end of the course, the student will be able to communicate basic concepts of NMR and MS spectroscopy of elements to others in a purposeful manner, using appropriate language. LEARNING SKILLS At the end of the course, the student will have increased their cultural background and their ability to learn and work independently.
--	--

PREREQUISITI

Italiano	Conoscenza di base della chimica organica e della fisica dell'elettromagnetismo.
<i>English</i>	Basic knowledge of organic chemistry and electromagnetism.

PROGRAMMA E CRONOPROGRAMMA

Italiano	Spettroscopia di Risonanza Magnetica Nucleare Introduzione. Lo spin nucleare e il momento magnetico. Effetto dei campi magnetici esterni. Il moto precessionale. Descrizione quantistica dei livelli energetici e della popolazione. Energia e sensibilità del segnale NMR. Energia e frequenza delle transizioni. Magnetizzazione macroscopica. L'eccitazione con impulsi di radiofrequenza. Origine del segnale NMR. Il sistema di riferimento ruotante. Il chemical shift. Frequenza di Larmor. Legge di Lenz. Effetti di schermo e deschermo. Definizione di campo effettivo e costante di schermo. La scala delta e composti di
-----------------	---



riferimento. Chemical shift e densità elettronica. Effetti di anisotropia: alchini, alcheni, e cicloalcani. Effetto di corrente di anello. Regioni dello spettro: tipi di idrogeno e di carbonio. Interazioni tra spin: costante dipolare e costante scalare. Origine della costante scalare. Analisi energetica della costante scalare per un sistema a due spin. Tipi di costanti scalari in base al numero di legami. Dipendenza della costante scalare dall'angolo diedro. IL rilassamento: meccanismi e legame con il moto molecolare in soluzione. Rilassamento spin-spin: origine ed effetto sullo spettro. Rilassamento e dimensione molecolare. Rilassamento spin-lattice: origine ed effetto sullo spettro.

L'andamento vettoriale della magnetizzazione nel sistema ruotante: chemical shift e costante di accoppiamento. La frequenza di riferimento dello spettro. Frequenze positive e negative nel sistema ruotante. Rilevamento del segnale in quadratura. La trasformata di Fourier. Analisi dell'impulso di eccitazione mediante la trasformata di Fourier. Il segnale digitale: velocità di campionamento. L'esperimento "pulse and collect". Determinazione dell'angolo di 90° per l'impulso. Data processing: aumento della sensibilità o della risoluzione.

Analisi di spettri ^1H . Numero di segnali. Simmetria in sistemi flessibili. La posizione del segnale di risonanza nello spettro. Intensità del segnale: l'integrale. Accoppiamento spin-spin e molteplicità. Predizione degli spettri ^1H . Determinazione di costanti di accoppiamento. Esempi di applicazione. Effetti di secondo ordine: l'accoppiamento forte. Spettroscopia di ^{13}C . L'abbondanza naturale del ^{13}C . Accoppiamenti ^{13}C - ^1H . Chemical shift. Tipi di carboni: spettri disaccoppiati, l'esperimento DEPT. Effetto NOE ^1H - ^{13}C e aumento dell'intensità del segnale. Problemi di analisi strutturale basati su dati di ^{13}C NMR. Il test di protoni attaccati.

Spettrometria di Massa

Introduzione. Il concetto di spettrometria di massa. Lo spettrometro di massa. Tecniche di introduzione del campione. Tecniche di ionizzazione: ionizzazione elettronica, chimica, bombardamento per atomi veloci, elettrospray, MALDI.

Analizzatori di massa. Concetti di risoluzione, di trasmissione e di limite superiore di massa. Settori magnetici ed elettrici. Quadrupoli. Tempo di volo. Ione-ciclotrone.

Analizzatori ibridi. Trappola ionica quadrupolare. Sistemi ibridi. Analisi comparativa dei diversi analizzatori.

Interpretazione degli spettri di massa ottenuti mediante ionizzazione elettronica: l'approccio empirico. Analisi degli spettri di alcol e di nitrocomposti aromatici. La frammentazione alfa. Teoria della localizzazione della carica. Analisi della stabilità dei prodotti per determinare la frammentazione. Frammentazioni primarie e secondarie. La regola dell'azoto per la determinazione del peso molecolare. Perdite di frammenti con massa pari e dispari. Riarrangiamenti in seguito alla perdita di molecole neutre.

Uso di tabelle per individuare frammenti e perdite. Analisi di spettri: strategie e regole. Pattern isotopico. Calcolo dell'intensità relativa dei picchi dovuti agli isotopi. Misura della massa esatta. Applicazioni. Risoluzioni di problemi strutturali con dati di spettroscopia di massa.



	Analisi di spettri di NMR e Massa Risoluzione di problemi utilizzando dati di ^1H-NMR, ^{13}C-NMR e di massa.
English	Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy Introduction. Nuclear spin and magnetic moment. External magnetic field effect. Precessional motion. Quantum-mechanical description of energy levels and populations. Energy and sensitivity of the NMR signal. Energy and transition frequencies. Macroscopic magnetization. Excitation through radiofrequency pulses. NMR signal origin. The rotating frame. Chemical shift. Larmor Frequency. Lenz Law. Shielding and deshielding effects. Definition of effective field and shielding constant. The delta scale and the reference compound. Chemical shift and electronic density. Anisotropic effects: alkynes, alkenes, and cyclo-alkenes. Ring current effect. Spectral regions: hydrogen and carbon types. Spin interactions: dipolar and scalar constants. Origin of the scalar constant. Energetic analysis of the scalar constant for a two-spin system. Types of scalar constants. Scalar constants and dihedral angles. Relaxation: mechanisms and connections to molecular motion in solution. Spin-spin relaxation: origin and effect on the spectrum. Relaxation and molecular size. Spin-lattice relaxation: origin and effect on the spectrum. Vector picture of the magnetization in the rotating frame: chemical shift and coupling constant. Spectral reference frequency. Positive and negative frequencies in the rotating frame. Quadrature detection of the signal. Fourier transformation. Analysis of the pulse excitation profile using the Fourier transformation. The digital signal: sampling rate. The "pulse and collect" experiment. Calibration of the 90° pulse duration. Data processing: sensitivity or resolution enhancement. Analysis of ^1H spectra: number of signals. Symmetry in flexible systems. Signal position in the spectrum. Signal intensity: integration. Spin-spin coupling and multiplicity. Prediction of ^1H spectra. Coupling constant measurement. Application examples. Second-order effects: strong coupling. ^{13}C spectroscopy. The natural abundance of ^{13}C. ^{13}C-^1H coupling constants. Chemical shift. Carbon types: decoupled spectra, the DEPT experiment. ^1H-^{13}C NOE effect and signal enhancement. Structural analysis problems using ^{13}C NMR data. The number of attached proton tests. Mass Spectrometry Introduction. The concept of mass spectrometry. The mass spectrometer. Sample introduction techniques. Ionization techniques: electron ionization, chemical ionization, fast atom bombardment, secondary ion mass spectrometry, electrospray, matrix-assisted laser desorption. Mass Analyzers. Concepts of resolution, transmission, and mass upper limit. Magnetic and electric sectors. Quadrupoles. Time of flight detector. Ion-cyclotron. Hybrid analyzers. Quadrupolar ionic trap. Hybrid systems. Comparative analysis of the different analyzers. Interpretation of mass spectra obtained with electronic ionization: the empirical approach. Analysis of spectra from alcohols and aromatic nitro compounds. The alpha-fragmentation. Theory of charge localization. Analysis of product stability to determine fragmentation.

	Primary and secondary fragmentation. The nitrogen rule for molecular weight determination. Loss of fragments with even and odd mass. Rearrangements with loss of a neutral molecule. Use of tables to detect fragments and losses. Spectral analysis: strategies and rules. Isotopic pattern. Calculation of the relative intensity of peaks due to isotopes. Exact mass measurement. Applications. Resolution of structural problems with data from mass spectrometry. Analysis of NMR and MS spectra Resolution of structural problems combining data from ^1H-NMR, ^{13}C-NMR, and MS.
--	---

TESTI ADOTTATI E BIBLIOGRAFIA DI RIFERIMENTO

Italiano	Field, L. D.; Sternhell, S.; Kalman, J. R. Organic Structures from Spectra, 5th ed.; John Wiley & Sons: Chichester, 2013.
<i>English</i>	Field, L. D.; Sternhell, S.; Kalman, J. R. Organic Structures from Spectra, 5th ed.; John Wiley & Sons: Chichester, 2013.

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.
<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	La verifica dell'apprendimento consiste nel sostenere esami scritti, comprendenti esercizi di determinazione strutturale, e una prova orale sui concetti teorici. La valutazione finale sarà attribuita secondo i seguenti criteri di accertamento dell'apprendimento: 18–21: lo studente ha acquisito i concetti fondamentali della disciplina e dimostra una capacità espositiva sufficientemente corretta, utilizzando un linguaggio appropriato, seppur essenziale. 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. 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. 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.
<i>English</i>	The learning control will consist of a written exam on structure determination and an oral exam on theoretical concepts. 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.

