

## COURSE SYLLABUS

### Analysis of Biomolecules

2223-1-F0802Q043

---

#### Obiettivi

L'insegnamento fornirà allo studente la descrizione dei principali metodi spettroscopici e spettrometrici utilizzati per l'analisi di molecole di piccole e medie dimensioni (metaboliti primari e secondari, piccole molecole di sintesi, peptidi, oligonucleotidi, oligosaccaridi).

In particolare verranno descritte le spettroscopie infrarossa (IR) e di Risonanza magnetica Nucleare (NMR) e la spettrometria di massa (MS).

Le esercitazioni pratiche consentiranno allo studente di apprendere la metodologia di identificazione della struttura chimica di una molecola organica a partire dai relativi spettri, anche con il supporto di siti web di spettri disponibili per scopi didattici.

#### Conoscenze e capacità di comprensione

Al termine di questa attività formativa, lo studente sarà in grado di:

1. descrivere i principi alla base della spettroscopia, della spettrometria di massa (MS) e della spettroscopia NMR;
2. descrivere le principali caratteristiche di uno spettro IR, di MS ed NMR e le informazioni in essi contenute;
3. descrivere le componenti fondamentali di strumenti MS;
4. descrivere le principali reazioni di frammentazione di molecole organiche che possono aver luogo in una sorgente di ionizzazione;
5. individuare nuclei attivi e sperimentalmente studiabili con la spettroscopia NMR;
6. descrivere le principali caratteristiche degli spettri NMR bidimensionali e le informazioni in essi contenute;
7. descrivere le principali applicazioni di IR, MS ed NMR allo studio delle biomolecole.

#### Capacità di applicare le conoscenze acquisite

Al termine di questa attività formativa, lo studente sarà in grado di:

1. correlare la frequenza e l'intensità delle bande presenti in uno spettro IR alla struttura dei composti organici e alle strutture secondarie delle proteine;
2. prevedere l'aspetto degli spettri IR, MS e NMR di semplici biomolecole organiche;
3. correlare dati sperimentali ottenuti da spettri IR, MS e NMR alle caratteristiche strutturali delle molecole organiche;
4. analizzare spettri di MS, IR e NMR determinando grandezze utili quali il rapporto  $m/z$ , le abbondanze relative

degli ioni, i chemical shift, le costanti di accoppiamento.

#### Autonomia di giudizio

Al termine di questa attività formativa, lo studente sarà in grado di:

1. scegliere le tecniche analitiche più adatte all'analisi strutturale di una molecola d'interesse;
2. selezionare le tecniche più adatte ad ottenere specifiche informazioni strutturali e conformazionali, nonché a studiare fenomeni di interazione molecolare;
4. attribuire i segnali presenti nello spettro  $^1\text{H-NMR}$  di una biomolecola a basso peso molecolare sulla base di spettri NMR mono- e bi-dimensionali (COSY, 2D-TOCSY, 2D-NOESY, HSQC).

#### Abilità comunicative

Alla fine dell'insegnamento lo studente saprà esprimersi in modo appropriato nella descrizione delle tematiche affrontate con proprietà di linguaggio e sicurezza di esposizione.

#### Capacità di apprendimento

Al termine di questa attività formativa, lo studente sarà in grado di:

1. raccogliere e comprendere le nuove informazioni utili per razionalizzare le proprietà strutturali di composti organici di interesse biologico;
2. raccogliere e comprendere le informazioni circa l'evoluzione delle tecniche spettroscopiche e spettrometriche nel contesto dell'analisi di biomolecole e delle loro interazioni molecolari.

## Contenuti sintetici

Teoria e applicazioni delle spettroscopie IR ed NMR e della spettrometria di massa all'analisi di biomolecole.

## Programma esteso

### Spettroscopia IR

Teoria della risonanza IR; bande caratteristiche delle classi di composti organici; discussione dettagliata delle modalità di assorbimento ed emissione della radiazione IR in relazione alla struttura molecolare.

### Spettrometria di massa

Principi della spettrometria di massa; massa esatta; sorgenti e analizzatori usati negli spettrometri di massa; applicazioni della spettroscopia di massa allo studio delle proteine

### Spettroscopia NMR

Il fenomeno dello spin nucleare; nuclei dotati di spin; il fenomeno dello spostamento chimico; l'accoppiamento di spin; gli spettri dell'idrogeno e del carbonio; lo spettrometro NMR a trasformata di Fourier; acquisizione dei dati e trasformazione del segnale; il trasferimento di magnetizzazione nello spazio e l'effetto NOE; spettri bidimensionali (COSY, TOCSY, NOESY ed HSQC); interpretazione di spettri di piccole molecole organiche (metaboliti, sostanze di sintesi); applicazioni della spettroscopia NMR a studi di riconoscimento molecolare e al disegno razionale di farmaci.

## Prerequisiti

Prerequisiti. Conoscenze base di chimica organica.

Propedeuticità. Nessuna

## **Modalità didattica**

Lezioni frontali ed esercizi pratici in aula sull'interpretazione di spettri.

L'insegnamento verrà tenuto in lingua italiana

## **Materiale didattico**

Slides. A disposizione sulla piattaforma e-learning dell'insegnamento.

Dispense. A disposizione sulla piattaforma e-learning dell'insegnamento.

Testi consigliati.

“Spectrometric Identification of Organic Compounds” R. M. Silverstein, F. X. Webster, D. Kiemle

“Guida Pratica alla interpretazione di Spettri NMR”, Antonio Randazzo.

## **Periodo di erogazione dell'insegnamento**

Primo semestre

## **Modalità di verifica del profitto e valutazione**

Esame scritto, basato su domande sulla teoria e sulle applicazioni di IR, MS e NMR, e la risoluzione di un esercizio che comporta l'assegnamento delle risonanze di una biomolecola a basso peso molecolare sulla base di spettri NMR mono- e bi-dimensionali. Lo scritto dura 2 ore.

## **Orario di ricevimento**

Ricevimento su appuntamento richiesto via mail al docente.

## **Sustainable Development Goals**

SALUTE E BENESSERE

---