

SCHEDA DELL' INSEGNAMENTO DI ANALISI SPETTROSCOPICA DEI NUTRACEUTICI

TITOLO INSEGNAMENTO IN INGLESE: SPECTROSCOPIC ANALYSIS OF NUTRACEUTICALS

Corso di Studio
SCIENZE NUTRACEUTICHE

Insegnamento

LMcu

A.A. 2018/2019

Docente: Roberta Teta

☎ 081 678507

email: roberta.teta@unina.it

SSD CHIM/06

CFU 6

Anno di corso (I, II, III) II

Semestre (I, II e LMcu) I

Insegnamenti propedeutici previsti: Chimica organica delle biomolecole

RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Conoscenza e capacità di comprensione

Il corso si propone di fornire allo studente le conoscenze sulle principali tecniche spettroscopiche utili alla caratterizzazione strutturale di molecole organiche di interesse nutraceutico e alla determinazione qualitativa delle stesse nelle matrici alimentari e nutraceutiche.

Conoscenza e capacità di comprensione applicate

Il corso mira allo sviluppo della capacità dello studente di riconoscere sulla base dei gruppi funzionali di molecole di interesse nutraceutico la tecnica spettroscopica più adatta alla caratterizzazione strutturale e all'analisi qualitativa delle stesse. Il corso consentirà allo studente di saper leggere e interpretare gli spettri derivanti dall'analisi spettroscopica di molecole organiche di interesse nutraceutico.

Autonomia di giudizio

Acquisizione della capacità di valutare autonomamente e criticamente la tecnica spettroscopica più adatta all'analisi delle molecole di interesse nutraceutico.

Abilità comunicative

Acquisizione di un linguaggio tecnico e scientifico adeguato alla disciplina.

Capacità d'apprendimento

Attraverso le conoscenze acquisite nel corso, migliorerà la capacità di apprendere i contenuti di tutti gli insegnamenti di approfondimento che prevedono conoscenze di analisi spettroscopica

PROGRAMMA

Introduzione ai metodi spettroscopici e Spettroscopia ultravioletta (1 CFU). Generalità sui metodi spettroscopici. La radiazione elettromagnetica; Legge di Planck; lo spettro elettromagnetico; meccanismi di interazione radiazione-materia; trasmittanza e assorbanza; l'energia delle molecole; le transizioni elettroniche; lo spettro UV; assorbimento UV di dieni coniugati; regole di Woodward e Fieser; polieni coniugati; lo spettro visibile e il colore. Assorbimenti UV di enoni, composti aromatici; lo spettrofotometro UV; monocromatori; cuvette e solventi per spettroscopia UV; strumenti a doppio raggio; tecniche ifenate: HPLC-UV; analisi qualitative e quantitative. Metodi chiroottici; la luce polarizzata linearmente; la rotazione ottica; il polarimetro; misura dell'eccesso enantiomerico; il dicroismo circolare; lo spettrofotometro CD.

Spettroscopia infrarossa (1 CFU). La radiazione infrarossa; modello dell'oscillatore armonico; frequenza e intensità di assorbimento IR; vibrazioni di stretching e di bending; lo spettro IR; accoppiamento tra vibrazioni; lo spettrometro IR; FT-IR. Assorbimenti dei principali gruppi funzionali dei nutraceutici.

Spettrometria di massa (2 CFU). Principi base di spettrometria di massa; lo spettrometro di massa: sorgente, analizzatore e detector; la sorgente ad impatto elettronico; l'analizzatore magnetico; lo spettro di massa; i picchi isotopici e loro utilità; spettrometria di massa e formula molecolare; massa ad alta risoluzione; la regola dell'azoto; l'indice di deficienza di idrogeno; la frammentazione; tipi di frammentazioni; scissioni semplici; riarrangiamento di McLafferty; frammentazioni tipiche per classi di composti; limiti della sorgente EI; la sorgente a ionizzazione chimica (CI); l'elettrospray (ESI); la sorgente MALDI; l'analizzatore a tempo di volo (TOF); l'analizzatore a quadrupolo; l'analizzatore a trappola ionica (Ion Trap); l'Orbitrap; spettrometria di massa tandem.

Spettroscopia di risonanza magnetica nucleare (2 CFU). La spettroscopia NMR; lo spin nucleare; il momento magnetico; l'equazione fondamentale dell'NMR; l'effetto schermante e descherante; il chemical shift; l'anisotropia diamagnetica; l'integrazione dei segnali NMR; la molteplicità dei segnali NMR; la regola N+1; l'accoppiamento spin-spin; le costanti di accoppiamento; l'accoppiamento scalare; l'accoppiamento dipolare; l'intensità relativa dei picchi in un segnale; esempi di spettri ^1H NMR; protoni diastereotopici; lo spettrometro NMR; i solventi per NMR; NMR a trasformata di Fourier; lo spettrometro NMR; Spettroscopia ^{13}C NMR; NMR bidimensionale.

SCHEDA DELL' INSEGNAMENTO DI ANALISI SPETTROSCOPICA DEI NUTRACEUTICI

TITOLO INSEGNAMENTO IN INGLESE: SPECTROSCOPIC ANALYSIS OF NUTRACEUTICALS

Corso di Studio
SCIENZE NUTRACEUTICHE

 Insegnamento

 LMcu

A.A. 2018/2019

CONTENTS

Introduction to spectroscopic techniques and Ultraviolet spectroscopy (1 CFU). General information on spectroscopic methods. Electromagnetic radiation; Planck's law; the electromagnetic spectrum; radiation-matter interaction mechanisms; transmittance and absorbance. The energy of the molecules; electronic transitions; the UV spectrum; UV absorption of conjugated dienes; Woodward and Fieser rules; conjugated polyenes; the visible spectrum and the color. UV absorption of enones, aromatic compounds; the UV spectrophotometer; monochromator; cuvettes and solvents for UV spectroscopy; double-beam instruments; hyphenated techniques: HPLC-UV; qualitative and quantitative analysis. Chiroptical methods; linearly polarized light; the optical rotation; the polarimeter; measure of enantiomeric excess; circular dichroism; the CD spectrophotometer.

Infrared spectroscopy (1 CFU). Infrared radiation; the harmonic oscillator model; frequency and intensity of IR absorption; stretching and bending vibrations; the IR spectrum; coupling of vibrations; the IR spectrophotometer; FT-IR. Absorption of the main functional groups of nutraceuticals.

Mass spectrometry (2 CFU). Basics of mass spectrometry; the mass spectrometer: source, analyzer and detector; electron impact (EI) ion sources, magnetic sector analyzer the mass spectrum; isotopic peaks and their use; mass spectrometry and molecular formula; high resolution mass; the nitrogen rule; the hydrogen deficiency index; fragmentation; types of fragmentation; cleavage; McLafferty rearrangement; organic molecules typical fragmentations; limits of the EI source; chemical ionization (CI), electrospray ionization (ESI), matrix assisted laser desorption (MALDI); quadrupole, ion trap, orbitrap, time of flight; tandem mass spectrometry.

Nuclear Magnetic Resonance (NMR) spectroscopy (2 CFU). NMR spectroscopy; the nuclear spin; the magnetic moment; the fundamental equation of the NMR; shielding and deshielding effect; the chemical shift; diamagnetic anisotropy; the integration of NMR signals; the multiplicity of NMR signals; the N+1 rule; spin-spin coupling; the coupling constants; the scalar coupling; dipolar coupling; examples of ^1H NMR spectra; diastereotopic protons; the NMR spectrometer; solvents for NMR; Fourier Transform NMR; ^{13}C NMR spectroscopy; two-dimensional NMR.

SCHEDA DELL' INSEGNAMENTO DI ANALISI SPETTROSCOPICA DEI NUTRACEUTICI

TITOLO INSEGNAMENTO IN INGLESE: SPECTROSCOPIC ANALYSIS OF NUTRACEUTICALS

Corso di Studio
SCIENZE NUTRACEUTICHE

☐ Insegnamento

☐ LMcu

A.A. 2018/2019

MATERIALE DIDATTICO

- M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh "Metodi spettroscopici in chimica organica" Ed. Edises
- R.M. Silverstein and F.X. Webster "Identificazione spettroscopica di composti organici" Ed. Ambrosiana;
- Diapositive del corso e materiale didattico distribuito a lezione e sul sito docente

MODALITA' DI ESAME

L'esame si articola in prova	Scritta e orale	x
Altro, specificare		

Solo scritta	

Solo orale	

In caso di prova scritta i quesiti sono (*)	A risposta multipla	
---	---------------------	--

A risposta libera	x
-------------------	---

Esercizi numerici	x
-------------------	---

(*) E' possibile rispondere a più opzioni