



MARTEDÌ 25 MARZO 2025 - ore 14.30

Online Piattaforma MS Teams

Esplorare le molecole con la risonanza magnetica nucleare: come utilizzare i software per NMR

(Prof.sse Francesca Vasile e Clelia Giannini)

Lo scopo di questa esperienza è introdurre i docenti all'uso di software avanzati per la simulazione e l'analisi degli spettri NMR, strumenti essenziali per la didattica e la comprensione delle tecniche spettroscopiche in chimica. In particolare, verranno presentati due software: Bruker Topspin e nmrdb, ciascuno con funzioni specifiche per supportare l'insegnamento e l'apprendimento della spettroscopia NMR.

Topspin è un software dedicato all'acquisizione e al processamento degli spettri NMR, progettato per consentire agli studenti di studiare uno spettro NMR. Saranno oggetto di studio i parametri di acquisizione da impostare, e le metodologie di processamento degli spettri per ottenere risultati di qualità. Questo strumento permette agli utenti di esplorare in modo interattivo il processo di acquisizione, migliorando la comprensione teorica e pratica della spettroscopia. Il software si può scaricare direttamente e gratuitamente del sito Bruker (<https://www.bruker.com/>) previa registrazione con un indirizzo mail istituzionale.

Per quanto riguarda l'analisi delle principali osservabili NMR, come il chemical shift e le costanti di accoppiamento, verrà introdotto il software nmrdb. Questo sito web (<https://www.nmrdb.org>) consente di simulare spettri monodimensionali di protoni (^1H) e carbonio (^{13}C), e offre la possibilità di disegnare molecole organiche per predire con precisione i valori di chemical shift e le costanti di accoppiamento. Grazie alla sua interfaccia intuitiva, nmrdb è uno strumento prezioso per esplorare come le strutture molecolari influenzano i segnali NMR, facilitando la comprensione dei fenomeni spettroscopici.

Questi software non solo rendono l'apprendimento più interattivo e pratico, ma offrono anche un'opportunità unica per i docenti di aggiornare e arricchire le proprie lezioni, utilizzando tecnologie all'avanguardia per avvicinare gli studenti alla chimica analitica moderna.

