

## OBIETTIVI FORMATIVI

La metabolomica è lo studio sistematico e ad ampio raggio di metaboliti presenti in un organismo o un campione. Lo scopo del corso è quello di introdurre l'analisi metabolomica. Saranno descritte le tecniche analitiche più utilizzate nel settore. Saranno quindi presentati i principi fisici che sono alla base delle tecniche di risonanza magnetica nucleare ed illustrati i metodi dell'analisi multivariata applicata ai dati spettroscopici. Il corso si propone inoltre di offrire agli studenti una panoramica delle applicazioni della metabolomica in diversi ambiti.

## PROGRAMMA METABOLOMICA

### TEORIA

Introduzione. Terminologia e definizioni. La complessità chimica del metaboloma. Applicazioni e finalità della metabolomica. Approcci metabolomici. Le tecniche analitiche. Cromatografia. Spettrometria di massa.

Spettroscopia NMR. Principi fisici. Numero di spin. Livelli energetici. Sensibilità. Precessione. Frequenza angolare. Magnetizzazione. Campo magnetico oscillante. Impulso di radioonda. Trasformata di Fourier.

Funzioni di apodizzazione. Finestre spettrali. Scala di chemical shift. Cenni di spettroscopia bidimensionale.

Chemical shift: costante di schermo, contributo diamagnetico, paramagnetico e locale. Elettronegatività, effetti mesomeri, contributi anisotropici di legami e anelli aromatici. Costante di accoppiamento scalare, multiplotti. Spettro 1D dell'alanina dal database BMRB.

Metodi di soppressione del segnale di solvente. Spettro 13C-1D di alanina da BMRB. Spettroscopia bidimensionale: eterocorrelazione, J-resolved, COSY, TOCSY.

Analisi multivariata. Esempi di applicazioni in analisi di succhi alimentari, olio, birra, tè, altro.

### LABORATORIO

Esercizi di interpretazione di spettri NMR di molecole organiche

Note pratiche sulla registrazione di spettri: preparazione del campione, controllo temperatura, lock, tuning, shimming, calibrazione impulso, numero di scansioni.

Preparazione di campioni di fluidi alimentari

Esecuzione spettri protonici

Analisi e interpretazione degli spettri con ausilio dei database spettrali

Analisi multivariata degli spettri registrati

### MODALITA' DI ESAME

Scritto

## EDUCATIONAL OBJECTIVES

Metabolomics is the systematic and holistic study of metabolites present in an organism or a sample. The purpose of the course is to introduce metabolomic analysis. We address the analytical techniques used in the field. We will then present the physical principles that underlie the technique of nuclear magnetic resonance and discuss the methods of multivariate analysis applied to spectroscopic data. The course also aims to provide students with an overview of the applications of metabolomics in different areas.

## PROGRAM metabolomics

### THEORY

Introduction. Terminology and definitions. The chemical complexity of the metabolome. Applications and purposes of metabolomics. Metabolomic approaches. The analytical techniques. Chromatography. Mass spectrometry.

NMR spectroscopy. Physical principles. Spin number. Energy levels. Sensitivity. Precession. Angular frequency. Magnetization. Oscillating magnetic field. Radiofrequency pulses. Fourier transform.

Apodization functions. Spectral windows. Chemical shift. Two-dimensional spectroscopy.

Chemical shift: shielding constant, diamagnetic, paramagnetic and local contributions. Electronegativity, mesomeric effects, anisotropic contributions of bonds and aromatic rings. Scalar coupling constant, multiplets. 1D spectrum of alanine from the BMRB database.

Methods of suppression of the signal of solvent. 1D  $^{13}\text{C}$  - alanine from the BMRB. Two-dimensional spectroscopy : heterocorrelation, J-resolved, COSY, TOCSY.

Multivariate analysis. Examples of applications in analysis of food juice, oil, beer, tea, others.

### LABORATORY

Exercises for the interpretation of NMR spectra of organic molecules

Practical notes on the recording of spectra : sample preparation, temperature control, lock, tuning, shimming, calibration pulse, number of scans.

Preparation of samples of food fluids.

Execution of proton spectra.

Analysis and interpretation of the spectra with the aid of spectral databases.

Multivariate analysis of the recorded spectra

### EXAMINATION

written