



FACOLTÀ DI FARMACIA
E MEDICINA

SAPIENZA
UNIVERSITÀ DI ROMA

DIPARTIMENTO DI CHIMICA
E TECNOLOGIE DEL FARMACO



**LABORATORIO DI
CHIMICA DEGLI ALIMENTI**
Sapienza Università di Roma

GIDRM 
Gruppo Italiano Discussione Risonanze Magnetiche



APPLICAZIONI DELLA RISONANZA MAGNETICA NELLA SCIENZA DEGLI ALIMENTI

Università La Sapienza di Roma, 23 - 24 giugno 2022

VII Workshop
Book of abstracts

SCIENTIFIC COMMITTEE

Luisa Mannina e Noemi Proietti (co-chairs)

Cinzia Ingallina

Francesco Capozzi

Antonio Randazzo

Marco Geppi

Marcello Alecci

Silvia Borsacchi

Mariapina D'Onofrio

Simonetta Geninatti Crich Giacomo Parigi

Giuseppe Pileio

LOCAL ORGANIZING COMMITTEE

Luisa Mannina

Noemi Proietti

Anatoly P. Sobolev

Valeria Di Tullio

Cinzia Ingallina

Mattia Spano

Giacomo Di Matteo

Andrea Salvo

SCIENTIFIC PROGRAM

23 giugno 2022

9.30 - 10.00 Registrazione dei partecipanti e affissione poster

10.00 - 10.20 Indirizzi di salute

Antonella Polimeni, Magnifica Retttrice Sapienza

Carlo Della Rocca, Presidente della Facoltà di Farmacia e Medicina, Sapienza

Claudio Villani, Direttore del Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Sapienza

Bruno Botta, Prorettore alle Politiche per l'Internazionalizzazione, Sapienza

10.20 - 10.30 Apertura dei lavori e presentazione attività **GIDRM** (Comitato Scientifico Organizzatore)

10.30 - 13.30 I Sessione: Moderatore Luisa Mannina

10.30 - 11.00 **Francesco Capozzi**, Università di Bologna, "Tutto quello che avreste voluto sapere sulla struttura degli alimenti (e non avete mai avuto il coraggio di chiederlo all'NMR)

11.00 - 11.20 **Francesco Paolo Fanizzi**, Università del Salento, "Dalla caratterizzazione dei prodotti vegetali al monitoraggio della salute delle piante: l'uso proficuo della spettroscopia NMR nella ricerca agroalimentare"

11.20 - 11.40 **Anatoly P. Sobolev**, CNR ISB, "Il primo studio di urine tramite ^{23}Na e ^{35}Cl : il monitoraggio di regimi dietetici"

11.40 - 12.00 **Flaminia Cesare Marincola**, Università di Cagliari, "Analisi metabolomica del latte umano pretermine durante il primo mese di allattamento: influenza del grado di prematurità

12.00 - 12.20 **Archimede Rotondo**, Università di Messina, "Studio olistico sui semi di pistacchio, differenze di genotipi e possibili riutilizzi degli scarti"

12.20 - 12.40 **Leonardo Tenori**, CERM, Università di Firenze, "Caratterizzazione NMR di diverse varietà di C. Arabica provenienti dal Nicaragua e sottoposte a diversi trattamenti post-raccolta"

12.40 – 15.00 Pranzo Buffet + sessione poster

15.00 - 16.00 II Sessione Moderatore: Noemi Proietti

15.00 - 15.20 **Adolfo Botana**, Jeol, "From liquid-state to solid-state NMR analysis of foods"

15.20 - 15.40 **Giacomo Di Matteo**, Sapienza Università di Roma, "Profilo NMR metabolomica di campioni di zucca protetti da biofilm"

15.40 - 16.00 **Claudia Napoli**, Bruker Italia Srl "Applicazioni del benchtop NMR su oli di oliva e altri alimenti"

16.00 - 16.30 Coffee break + sessione poster

16.30 - 17.100 III Sessione: Moderatore Anatoly P. Sobolev

16.30 - 16.50 **Marica Antonicelli**, Politecnico di Bari, "Analisi non-targeted basata su ^1H -NMR per accertare l'autenticità dello zafferano"

16.50 - 17.10 **Giovanna Loredana La Torre**, Università di Messina, “**Caratterizzazione** di estratti di *Hermetia Illucens*: il bioconvertitore del futuro?”

17.10 - 18.00 IV Sessione: Poster

24 giugno 2022

9.30 - 10.40 V Sessione: Moderatore: Antonio Randazzo

9.30 - 9.40 **Raffaele Lamanna**, ENEA, GIS-NMR: Profili metabolici spazialmente correlati come strumento per l'agricoltura di precisione nella coltura del grano duro”

9.40 - 10.00 **Mattia Sozzi**, Politecnico di Torino, “La spettroscopia ^1H NMR come strumento per il monitoraggio e l'ottimizzazione dei processi di estrazione e idrolisi enzimatica da farina di lenticchie”

10.00 - 10.20 **Alba Lasalvia**, Sapienza Università di Roma, “Bacche e foglie di goji: uno studio metabolomico mediante Spettrometria di Massa ad Alta Risoluzione”

10.20 - 10.40 **Nicola Cavallini**, Politecnico di Torino, “Nascita di una toolbox: import, visualizzazione, analisi e risoluzione chemiometrica di spettri ^1H NMR”

10.40 - 11.20 Coffee break + sessione poster

11.20 - 12.20 VI Sessione: Moderatore: Raffaele Lamanna

11.20-11.40 **Alberto Ritieni**, Università degli Studi di Napoli Federico II, “Se solo potessi telefonare al Food Lab”

11.40 - 12.00 **Angelo Galante**, Università de L'Aquila, LNGS, CNR, “Quantitative ^1T MRI Post-Harvest Surveying of *Tuber Aestivum* Ascomata”

12.00 - 12.20 **Mattia Spano**, Sapienza Università di Roma, “Applicazione di un approccio chemiometrico-NMR per la classificazione geografica di oli extra vergine di oliva italiani”

12.20- 12.40 **Roberto Consonni**, CNR- SCITEC, L'NMR un valido strumento per la caratterizzazione del miele”

Fine lavori

12.20- 14.00 Pranzo Buffet

14.00-15.00 Incontro gruppo NMR-Alimenti

NASCITA DI UNA TOOLBOX: IMPORT, VISUALIZZAZIONE, ANALISI E RISOLUZIONE CHEMIOMETRICA DI SPETTRI 1H-NMR

N. Cavallini,[‡] M. Sozzi,[‡] M. Cocchi,[†] F. Savorani[‡]

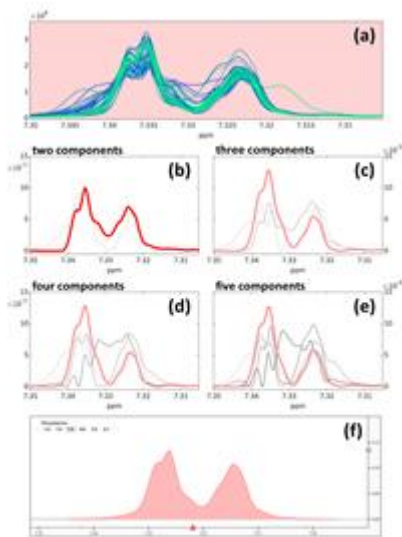
[‡]Dipartimento di Scienza Applicata e Tecnologia, Politecnico di Torino, Corso Duca degli Abruzzi 24
– 10129 Torino, Italia

[†]Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologica, Via Campi 104 – 41125 Modena, Italia
E-mail: nicola.cavallini@polito.it

L'analisi di spettri interi mediante metodi chemiometrici [1] presenta spesso alcune limitazioni pratiche, come l'interpretazione a volte poco accessibile dei segnali o come il costo computazionale richiesto. Questa situazione si verifica soprattutto con la presenza di numerosi campioni, e vale sia per l'analisi esplorativa che per eventuali successive modellazioni di regressione/classificazione, dato che il punto di partenza di tali analisi è la "tabella numerica" contenente gli spettri NMR: più questa sarà grande, più aumenterà il costo computazionale.

Un primo passo nella direzione di semplificare la gestione e l'analisi dei dati NMR può essere l'utilizzo di un approccio ad intervalli [2], che prevede la creazione di tanti "modelli locali" (cioè corrispondenti a zone accuratamente selezionate dello spettro), permettendo così di ridurre i problemi di linea di base, rumore e, in parte, di costo computazionale. Un ulteriore passaggio consiste nell'estrazione di feature dal set di dati, sempre con un approccio ad intervalli. Ciò è fattibile in diverse maniere, ma l'obiettivo è solitamente quello di ottenere delle feature a cui sia possibile dare un nome chimico (anche se provvisorio/preliminare), cioè un'assegnazione molecolare del segnale descritto dalla feature. L'assegnazione si basa solitamente sul confronto del segnale descritto dalla feature con librerie di riferimento, database e articoli di letteratura. Il risultato è un set di dati "compresso", a ridotto contenuto di rumore, facilmente interpretabile.

I passaggi fin qui descritti trovano difficile applicazione utilizzando gli strumenti a disposizione di ricercatori e ricercatrici, in quanto si tratta spesso di software e tool particolarmente specializzati, o specifici per un determinato formato di dati. Lo scopo di questo intervento è quindi quello di presentare un'idea di toolbox sviluppata in ambiente MATLAB che raggruppi gran parte dei passaggi di analisi dati sopra descritti. Verranno presentati alcuni casi studio in cui l'applicazione di tecniche ad intervalli per la risoluzione dei segnali ha fornito interpretazioni molto chiare e risultati confrontabili se non migliori rispetto all'approccio a spettro intero [3–5], e durante il cui sviluppo sono state codificate le funzioni di base della toolbox. Verrà inoltre posta molta attenzione alla questione dell'interpretazione dei risultati e delle feature estratte, oltre che alla loro corretta assegnazione chimica considerando diversi livelli di confidenza [6].



Referenze

- [1] P. Ebrahimi, N. Viereck, R. Bro, S.B. Engelsen, *Mod. Magn. Reson.* 1-20 (2017)
- [2] F. Savorani, M.A. Rasmussen, Å. Rinnan, S.B. Engelsen, *Data Handl. Sci. Technol.*, 449-486 (2013)
- [3] N. Cavallini, F. Savorani, R. Bro, M. Cocchi, *Molecules*, 26, 1472 (2021)
- [4] V. Righi, N. Cavallini, A. Valentini, G. Pinna, G. Pavesi, M.C. Rossi, A. Puzzolante, A. Mucci, M. Cocchi, *NMR Biomed.*, 33(3), e4234 (2019)
- [5] B. Khakimov, N. Mobaraki, A. Trimigno, V. Aru, S.B. Engelsen, *Anal. Chim. Acta*, 1108, 142-151 (2020)
- [6] M.R. Viant, I.J. Kurland, M.R. Jones, W.B. Dunn, *Curr. Opin. Chem. Biol.* 36, 64-69 (2017)