

## **Metabolomica in generale**

Dare una definizione di metabolomica

Spiegare la differenza tra metabolomica e metabonomica

Cosa può aggiungere l'informazione metabolomica rispetto a quella genomica o proteomica?

Fornire una lista di potenziali applicazioni della metabolomica

Descrivere la diversità chimica di un metaboloma

Cosa si intende per 'metabolic fingerprinting' ?

In base a quale caratteristica chimico-fisica è possibile separare le componenti di una miscela di molecole utilizzando rispettivamente la cromatografia liquida, la elettroforesi capillare, la gas-cromatografia?

Quale tecnica cromatografica è consigliata per la separazione rispettivamente di olii essenziali e acidi organici?

Elencare almeno due vantaggi per ciascuna delle tecniche GC/MS e LC/MS in metabolomica

Quali caratteristiche rendono la spettroscopia NMR competitiva in metabolomica?

## Principi base spettroscopia NMR

Quale caratteristica fisica devono possedere i nuclei atomici per essere osservabili in NMR?

Quanti sono i livelli energetici del nucleo di  $^{13}\text{C}$  ed a quali valori di momento magnetico di spin corrispondono?

Perché è necessaria la presenza di un campo magnetico per osservare un segnale NMR?

Come si realizza tecnicamente un campo magnetico di forte intensità per spettroscopia NMR?

In che modo è possibile aumentare il segnale NMR?

Mostrare l'andamento di un FID (Free Induction Decay) e giustificarne la forma

In che modo è possibile ottenere un impulso di radioonda selettivo?

Qual è il vantaggio di una spettroscopia ad impulsi?

Cos'è la trasformata di Fourier? Mostrare un esempio grafico.

Descrivere brevemente lo spostamento chimico (chemical shift)

Che tipo di sostanze si utilizzano come riferimento per la scala dei chemical shifts?

I segnali di idrogeni di olefine cadono a frequenze più alte o più basse rispetto a quelli di idrocarburi saturi? Spiegare

Spiegare l'accoppiamento scalare

Cos'è il vettore magnetizzazione? Qual è l'effetto su di esso di un impulso di  $90^\circ$ ?

Il segnale di un nucleo accoppiato con altri due tra loro equivalenti appare come un tripletto. Quali sono le intensità relative? Spiegare

In che modo è possibile eliminare per via spettroscopica il segnale del solvente acquoso?

Come si prepara un campione di succo di frutta per analisi NMR?

Come si prepara un campione di olio per analisi NMR?

## Interpretazione di spettri NMR

Mostrare e spiegare lo spettro protonico di etanolo in acqua.

Mostrare e spiegare lo spettro di carbonio di etanolo naturale in acqua.

Mostrare e spiegare lo spettro protonico di alanina in acqua.

Spiegare lo spettro  $^1\text{H}$  del glucosio nella regione 4.5-5.5 ppm, con riferimento alla struttura molecolare

Spiegare lo spettro  $^1\text{H}$  del fruttosio nella regione 4.5-5.5 ppm, con riferimento alla struttura molecolare

A quale metabolita appartengono i segnali più intensi attesi per un campione di succo di frutta?

Spiegare lo spettro della regione 3.5-8.0 ppm di olio di oliva in  $\text{CDCl}_3$ .

A cosa può essere assegnato il segnale a più basse frequenze di un olio di oliva?

Quali sono i segnali attesi in uno spettro  $^1\text{H}$ -NMR di caffeina?

Quali effetti può produrre la variazione di temperatura sul profilo NMR di una miscela di composti?

E' possibile registrare un profilo  $^{13}\text{C}$ -NMR di un succo di frutta?

A cosa può servire uno spettro di correlazione NMR-TOCSY?

## **Analisi statistica multivariata**

Perché si utilizzano metodi di analisi statistica multivariata in metabolomica?

Spiegare brevemente a cosa serve l'analisi alle componenti principali (PCA).

In cosa consistono 'scores plot' e 'loadings plot' in una analisi PCA?

Nell'analisi alle componenti principali quali parametri statistici (es. media, mediana, deviazione standard, varianza, correlazione) vengono valutati e perché.

Perché spesso sono sufficienti poche dimensioni per ottenere informazioni su una popolazione di campioni multivariati?

Quali operazioni è necessario eseguire su un insieme di dati NMR di tipo metabolomica prima di una analisi statistica multivariata?

Spiegare la differenza tra metodi 'supervised' e 'unsupervised'