

**VI Workshop**  
**Applicazioni della Risonanza Magnetica**  
**nella Scienza degli Alimenti**  
**in ricordo di Anna Laura**



*In memoria di Anna Laura Segre*

**VI Workshop**  
**Applicazioni della Risonanza Magnetica**  
**nella Scienza degli Alimenti**  
**in ricordo di Anna Laura**

*Aula A R. Giuliano*  
*Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Facoltà di Farmacia e Medicina,*  
*Sapienza Università di Roma, 21-22 Giugno 2018*

Applicazioni della Risonanza Magnetica nella Scienza degli Alimenti  
**Comitato scientifico**

Luisa Mannina, Donatella Capitani *Co-chairs*

Noemi Proietti

Francesco Capozzi

Maurizio Delfini

Stefano Mammi

Antonio Randazzo

Andrea Salvo

Marco Geppi

Lucia Calucci

Michele R. Chierotti

Maria Pina D'Onofrio

Giuseppe Pileio

Paola Turano

**Comitato organizzatore**

Noemi Proietti, Luisa Mannina, Donatella Capitani, Enrico Rossi, Anatoly P. Sobolev,  
Valeria Di Tullio, Cinzia Ingallina, Antonio Puglisi, Giorgio Giardini

**Segreteria**

Noemi Proietti, Valeria Di Tullio, Cinzia Ingallina

e-mail: [alimenti2018@gidrm.org](mailto:alimenti2018@gidrm.org)

Tel. 06 906729700/908/385/476

fax 06 90672477

## PROGRAMMA SCIENTIFICO

21 Giugno 2018

9.30 - 10.00 **Registrazione dei partecipanti**

10.00 - 10.30 **Indirizzi di salute**

**Eugenio Gaudio**, Rettore Sapienza, Università di Roma

**Carlo Della Rocca**, Preside della Facoltà di Farmacia e Medicina,  
Sapienza, Università di Roma

**Bruno Botta**, Direttore Dipartimento CTF, Sapienza, Università di Roma

**Francesco Loreto**, Direttore Dipartimento Scienze Bio-Agroalimentari,  
(DiSBA) CNR

**Giovanna Mancini**, Direttore Istituto di Metodologie Chimiche, CNR

**Daniela Maurizi**, Segretario della Federazione degli Ordini dei Chimici  
e dei Fisici

**Apertura dei lavori e presentazione attività GIDRM**

Donatella Capitani, Luisa Mannina (Comitato Scientifico Organizzatore, Sapienza  
Università di Roma)

10.30 - 12.30 **I Sessione**, Moderatore: **Luisa Mannina**

10.30 - 10.55 **Francesco Capozzi**, Alma Mater Studiorum, Università di Bologna

“Dieci anni dopo: una overview sulla risonanza magnetica in campo  
alimentare.”

10.50 - 11.20 **Francesco Paolo Fanizzi**, Università del Salento

“<sup>1</sup>H NMR di EVOO monocultivar provenienti da Puglia e Toscana:  
Influenza delle caratteristiche pedoclimatiche.”

11.20 - 11.45 **Nicola Funicello**, Università degli Studi di Salerno

“Caratterizzazione varietale di diverse cultivar di Olea europea L.  
mediante tecniche MRI.”

11.45 - 12.00 **Archimede Rotondo**, Università di Messina

“Protocollo NMR e trattamento dati rivolto ad una rapida e completa  
etichetta nutrizionale per olii di oliva.”

- 12.00 - 12.15 **Enrica Donati**, IMC-CNR Roma  
 “Studio di fitonutrienti e sostanze bioattive presenti nelle foglie di olivi secolari: Un approccio multimetodologico.”
- 12:15 – 12:30 **Maria Carmela Emanuele, Stefano Checcarelli**, Costa d’Oro Spa  
 “Oli non filtrati, non solo un ritorno alla natura, ma anche nutrizione con più benessere.”
- 12.30 - 15.00 Pranzo Buffet**
- 15.00 - 16.10 **II Sessione**, Moderatore: **Francesco Capozzi**
- 15.00 - 15.15 **Pierluigi Mazzei**, Università di Napoli Federico II  
 “Risonanza Magnetica Nucleare per discriminare campioni di pappa reale in funzione dell’origine geografica, del periodo di produzione e del tipo di fioriture accessibili.”
- 15.10 - 15.30 **Elisabetta Schievano**, Università di Padova  
 “Quantificazione di carboidrati in miscele complesse. Uno studio sul miele.”
- 15.30 - 15.45 **Raffaele Lamanna**, ENEA  
 “EntomoNMR: approccio preliminare allo studio NMR DI nuovi alimenti a base di insetti.”
- 15.45 - 16.00 **Chiara Roberta Girelli**, Università del Salento  
 “Caratterizzazione del profilo metabolico di diversi compartimenti della scifomedusa *Rhizostoma pulmo*: risultati preliminari.”
- 16.00 – 16.15 **Flaminia Cesare Marincola**, Università di Cagliari  
 “Dinamica del profilo metabolico del latte materno di mamme con parto pretermine: colostro, transizione e maturo.”
- 16.15 - 16.45 Coffee break**
- 16.45 – 17.50 **III Sessione**, Moderatore: **Antonio Randazzo**
- 16.45 – 17.00 **Alexandros Patsilidakos**, Sapienza Università di Roma  
 “eALIERB: La piattaforma web.”

- 17.00 - 17.25 **Cinzia Ingallina**, Sapienza Università di Roma  
“Caratterizzazione e valorizzazione degli alimenti con *e*ALIERB-  
OPENLAB: il caso del peperone Cornetto di Pontecorvo DOP.”
- 17.25 – 17.50 **Simone Circi**, Sapienza Università di Roma  
“Caratterizzazione di pomodori del basso Lazio attraverso un approccio  
multimetodologico.”

## 22 Giugno 2018

- 9.30 - 10.40 **IV Sessione**, Moderatore: **Donatella Capitani**
- 9.30 - 9.45 **Francesco Savorani**, Politecnico di Torino  
"Monitoraggio real-time del grado di tostatura del caffè mediante spettroscopia NIR e analisi multivariata dei dati."
- 9.45 - 10.00 **Fabio Sciubba**, Sapienza Università di Roma  
"Sviluppo di radici di carota viola e arancione valutato mediante Risonanza Magnetica Nucleare."
- 10.00 - 10.15 **Lucia Marchetti, Davide Bertelli** Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia  
"Determinazione simultanea dei principi attivi di *Glycine max* L. e *Humulus lupulus* L. in integratori alimentari."
- 10.15 - 10.40 **Laura Del Coco**, Università del Salento  
"Studio  $^1\text{H}$  NMR dei profili metabolomici di vini trattati con metodo del ripasso con vinacce per la rimozione di ota."
- 10.40 - 11.10** *Coffee break*
- 11.00 - 12.30 **V Sessione**, Moderatore: **Francesco Paolo Fanizzi**
- 11.00 - 11.25 **Matteo Arena**, Sapienza Università di Roma  
"Metabolomica basata su spettroscopia NMR per l'individuazione di biomarcatori urinari di effetto e di trasformazione metabolica di farmaci anti-HCV."
- 11.25 - 11.50 **Ivan Anchesi**, Università degli Studi di Messina  
"Quantificazione della trimetilamina (tma) e trimetilaminossido (tmao) nei fluidi biologici: effetti specifici della dieta."
- 11.50 - 12.15 **Claudia Napoli**, Bruker Italia Srl  
"Novità sui Metodi  $^1\text{H}$ -NMR Per Controlli di Qualità e Autenticità degli Alimenti."
- 12.20 - 14.00** *Pranzo Buffet*

- 14.00 - 16.00** *Gli Amici di Anna Laura*
- 14.00 – 14.10** **Anatoly P. Sobolev**, IMC – CNR Roma  
“La Risonanza Magnetica e gli alimenti: l’eredità di Annalaura Segre.”
- 14.10 – 14.20** **Noemi Proietti**, IMC – CNR Roma  
“La Risonanza Magnetica nell’arte: un’intuizione di Anna Laura Segre.”
- 14.20 – 14.30** **Claudio Luchinat**, CERM Università degli Studi di Firenze  
“Amyloidogenesis: lessons from solution and solid state NMR.”
- 14.30 – 14.40** **Stéphane Viel**, Aix-Marseille Université  
“Using dynamic nuclear polarization to enhance the solid-state NMR investigation of organic materials.”
- 14.40 – 14.50** **Fabio Ziarelli**, CNRS Aix-Marseille Université  
“EMMA and MARCO for and beyond NMR.”
- 15.00 – 15.10** **Alessandro Piccolo**, Università di Napoli Federico II  
“La sostanza organica naturale e CPMAS-NMR.”
- 15.10 – 15.20** **Alberto Ritieni**, Università di Napoli Federico II  
“Anna Laura, una donna risonante che ha unito mondi diversi.”
- 15.20 – 15.30** **Corrado Fanelli**, Sapienza Università di Roma  
“Sistemi optoelettronici per la *detection* di micotossine negli alimenti.”
- 15.30 – 15.40** **Giovanna Mancini**, IMC-CNR Roma  
“Le interazioni idrofobe nel trasferimento di chiralità da molecole a sistemi complessi.”
- 15.40 – 15.50** **Maurizio Delfini**, Sapienza Università di Roma  
“Il percorso dei polimeri.”



# **COMUNICAZIONI**

## **DIECI ANNI DOPO: UNA OVERVIEW SULLA RISONANZA MAGNETICA IN CAMPO ALIMENTARE**

F. Capozzi, G. Picone, E. Urbinati

Dipartimento di Scienze e Tecnologie Agro-alimentari,  
Alma Mater Studiorum – Università di Bologna, Piazza Goidanich 60, 47521 Cesena (FC), Italia

E-mail: [francesco.capozzi@unibo.it](mailto:francesco.capozzi@unibo.it)

Dieci anni sono passati dalla prematura scomparsa di Anna Laura, una delle più eclettiche scienziate del panorama internazionale, dapprima fisica poi convertita alla chimica, caratterizzata da una prerogativa che, ora più che mai, acquista il giusto significato per l'impatto nella risonanza magnetica: propensione alla innovazione attraverso applicazioni trans-disciplinari. Dalla prima edizione commemorativa organizzata dalle sue allieve nel 2009, dal titolo emblematico "La Risonanza Magnetica: dalla struttura molecolare al sito archeologico", non ho mai mancato un appuntamento, consapevole di essere parte della stessa famiglia scientifica. Ogni volta ho cercato di esprimere una nuova tendenza, un differente aspetto, un particolare quesito, approfittando della continua evoluzione che attraversava il campo di ricerca, sia dal lato spettroscopico che da quello agro-alimentare. Ogni volta sono stato contaminato dalle esperienze maturate nella mia comunità scientifica di riferimento, a partire da quella che è stata la mia prima grande sfida: l'effetto paramagnetico nella risonanza magnetica nucleare. Ciò che per tanti è una complicazione nella già complessa arte dell'interpretazione degli spettri NMR, diventa una presenza da sfruttare per ottenere informazioni in maniera semplice. La prima applicazione con alla base l'*ovometro*, un'appendice di uno spettrometro a bassa risoluzione, in grado di misurare, direttamente nell'alimento intatto, la freschezza dell'uovo, sfruttando il tempo di rilassamento nucleare longitudinale dell'albume, condizionato dalla diffusione di ferro(III) dal tuorlo all'albume. Quindi, la scoperta di specie contenenti eme negli estratti di carne che lasciavano intravedere molecole differenti da ossi-, deossi- e met-mioglobina (Fig. 1). A distanza di dieci anni le ricerche sono state più focalizzate a comprendere la struttura della matrice alimentare eterogenea, intesa come sistema sovra-molecolare compartimentalizzato limitante la libera diffusione dei nutrienti verso il sito di assorbimento. Durante il cammino che ha portato la mia ricerca allo stato attuale, ho attraversato il puzzle della complessità, da quelli metodologici (normalizzazione degli spettri) all'analisi dei dati (la foodomica non come approccio analitico ma come indagine olistica dei sistemi complessi), continuando così nello spirito di quanto praticato da Anna Laura, quello di perlustrare nuovi ambiti con approccio trans-disciplinare [1, 2, 3]. Una overview di questo percorso sarà brevemente presentata con l'intento di stimolare il confronto tra i diversi esperti su ciò che verrà.

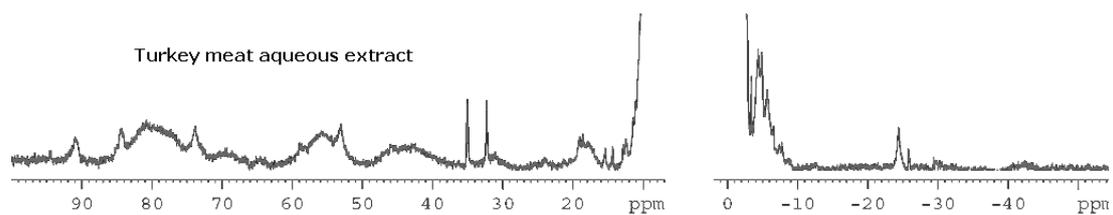


Fig. 1. Spettro protonico (400 MHz) di un estratto di carne di tacchino.

## Referenze

- [1] L. Laghi, G. Picone, F. Capozzi, *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, **59**, 93-102 (2014)
- [2] E. Marcolini et al, *Journal of agricultural and food chemistry*, **63**, 4973-4978 (2015)
- [3] F. Capozzi, *NMR-Based Metabolomics*, in G.A. Webb eds. *Modern Magnetic Resonance*, (2017) pp.1-21, Springer, Cham [https://link.springer.com/referenceworkentry/10.1007/978-3-319-28275-6\\_22-1](https://link.springer.com/referenceworkentry/10.1007/978-3-319-28275-6_22-1).

# **<sup>1</sup>H NMR DI EVOOs MONOCULTIVAR PROVENIENTI DA PUGLIA E TOSCANA: INFLUENZA DELLE CARATTERISTICHE PEDOCLIMATICHE**

C. R. Girelli,<sup>‡</sup> L. Del Coco,<sup>‡</sup> F. Angilè,<sup>‡</sup> S. Zelasco,<sup>†</sup>  
A. Salimonti,<sup>†</sup> F. L. Conforti,<sup>§</sup> F. P. Fanizzi<sup>‡</sup>

<sup>‡</sup> Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biologiche ed Ambientali (Di.S.Te.B.A.), Università del Salento,  
Prov.le Lecce-Monteroni, 73100 Lecce, Italy

<sup>†</sup> Council for Agricultural Research and Economics - Research Centre for Olive, Citrus and Tree Fruit  
C.da Rocchi 87036 Rende (CS), Italy

<sup>§</sup> CNR-Institute of Neurological Sciences Località Burga-Piano Lago-87050 Mangone (CS), Italy

E-mail:fp.fanizzi@unisalento.it

L'olio d'oliva è l'elemento centrale dell'alimentazione mediterranea tradizionale per il suo crescente consumo in tutto il mondo. La necessità di uno strumento scientifico per valutare l'origine geografica degli oli extra vergini di oliva (EVOOs) è una questione attuale, dal momento che il regolamento dell'Unione Europea n. 182 del 6 marzo 2009 (sull'etichettatura obbligatoria degli EVOOs, in tutti i paesi europei, con indicazione dell'origine geografica delle olive) è ancora carente di una metodologia ufficiale di convalida sperimentale [1]. Lo stesso vale per il regolamento dell'Unione Europea 1151/2012, che mira a rafforzare la politica europea di qualità per i prodotti agricoli. Tale regolamento comprende misure a sostegno delle attività agricole e di trasformazione nonché i sistemi di allevamento associati a prodotti di alta qualità, commercializzati con una DOP o IGP, in linea con gli obiettivi della politica di sviluppo rurale dell'UE [2].

Siamo attualmente coinvolti in numerosi studi di metabolomica e chemometria, basati su NMR, per valutare la composizione in cultivar e le aree geografiche di origine degli oli EVOOs, in particolare per la produzione di olio di oliva italiano DOP, IGP e blend 100% italiano[3-6]. In questo lavoro, viene presentata un'analisi comparata dei risultati ottenuti analizzando, mediante spettroscopia NMR e analisi statistica multivariata, EVOOs monocultivar, geneticamente certificati, provenienti da due aree geografiche, Puglia e Toscana, caratterizzate da un grado di omogeneità delle caratteristiche pedoclimatiche sensibilmente diverso.

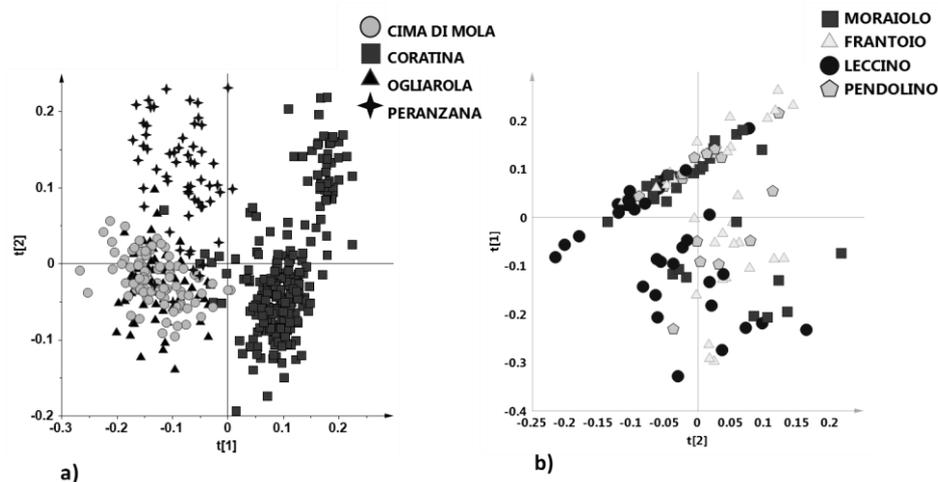


Fig. 1. PLS-DA delle principali cultivar pugliesi a) e IGP toscano b) studiate con la collaborazione di: Oliveti Terra di Bari (Bari) e Certified Origins Italia (Braccagni - Grosseto)

## Referenze

- [1] Regolamento (CE) n. 182/2009 della Commissione, del 6 marzo 2009 , che modifica il regolamento (CE) n. 1019/2002 relativo alle norme di commercializzazione dell'olio di oliva.
- [2] Regolamento (UE) n. 1151/2012 del Parlamento europeo e del Consiglio, del 21 novembre 2012 , sui regimi di qualità dei prodotti agricoli e alimentari
- [3] Del Coco L., Mondelli, D., Mezzapesa, G.N., Miano, T., De Pascali, S.A., Girelli, C.R., Fanizzi, F.P. *J Am Oil Chem Soc*, 93, 373-381 (2016)
- [4] Girelli, C.R., Del Coco, L., Fanizzi, F.P., *Eur J Lipid Sci Tech* 118, 1380–1388 (2016)
- [5] Girelli, C.R., Del Coco, L., Papadia, P., De Pascali, S.A., Fanizzi, F.P. *Peerj*, 4, e2740 (2016)
- [6] Binetti, G., Del Coco, L., Ragone, R., Zelasco, S., Perri, E., Montemurro, C., Valentini, R., Naso, D., Fanizzi, F.P., Schena, F.P., *Food chemistry*, 219, 131-138 (2017)

# CARATTERIZZAZIONE VARIETALE DI DIVERSE CULTIVAR DI OLEA EUROPEA L. MEDIANTE TECNICHE MRI

N. Funicello

Dipartimento di Fisica "E.R. Caianiello", Università degli Studi di Salerno, Via Giovanni Paolo II 132, 84084 Fisciano (SA) E-mail: nicolafunicello@libero.it

L'olivo (*Olea europaea* L.) è una pianta tipicamente mediterranea, particolarmente adattata, dunque, a regioni di tipo temperato caldo caratterizzate da stagioni estive lunghe ed asciutte. È una pianta arborea sempreverde di medio sviluppo (4 - 8 metri di altezza). Il frutto dell'olivo è una drupa di peso variabile tra (0,5 e 20) g, formata da epicarpo, mesocarpo, endocarpo e più internamente dal seme. I componenti quantitativamente più importanti del frutto fresco sono l'acqua (40-70 %) e le sostanze grasse (6-25%), contenute principalmente nel mesocarpo. Nei riguardi dell'oliva risulta difficile parlare di composizione media data la sua notevolissima differenziazione varietale che si traduce in un'elevata variabilità compositiva. Il frutto può essere impiegato sia per l'ottenimento dell'olio che per il consumo diretto. L'olio risulta presente principalmente nella polpa (16-25% del peso fresco) e limitatamente nella mandorla della drupa dell'oliva (1-1,5% del peso fresco). La qualità dell'olio d'oliva cambia in modo significativo a seconda della cultivar considerata. In questo studio, l'Imaging a Risonanza Magnetica (MRI) è stato utilizzato per caratterizzare diverse cultivar di olive Campane (Pisciottana, Coratina, Frantoio, Locale). I vantaggi principali delle tecniche MRI sono: semplice preparazione del campione, analisi non invasive e non distruttive, valutazione complessiva delle caratteristiche del frutto. Gli esperimenti MRI sono stati eseguiti con uno spettrometro Bruker ASCEND™ 300 MHz wide bore 89 mm con un probe per microimaging MicWB40. Per ogni cultivar sono state realizzate mappe in  $T_1$  e  $T_2$ , utilizzando rispettivamente sequenze Multi-Slice Multi-Echo e Inversion Recovery. Dalle mappe sono stati ricavati gli istogrammi  $T_1$  e  $T_2$  dai quali, attraverso un'analisi PCA (Principal Component Analysis), è stato possibile discriminare le diverse cultivar.



Fig. 1 Immagine reale e MRI 3D di un'oliva Pisciottana.

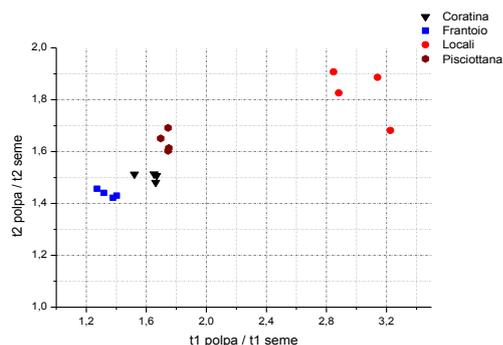


Fig. 2 Rappresentazione dei campioni di olive secondo il modello PCA

## Referenze

- [1] C. Di Vaio, S. Nocerino, A. Paduano, and R. Sacchi *J. Sci. Food Agric.* **93**, 1134-1139 (2013).
- [2] F. Capozzi, L. Laghi, and P. S. Belton, *Magnetic Resonance in Food Science: Defining Food by Magnetic Resonance*, Royal Society of Chemistry, London, 2015.
- [3] L. Mannina, and A. P. Sobolev *Magn. Reson. Chem.* **49**, S3-S11 (2011).
- [4] G. Binetti, L. Del Coco, R. Ragone, S. Zelasco, E. Perri, C. Montemurro, R. Valentini, D. Naso, F. P. Fanizzi, and F. P. Schena *Food Chem.* **219**, 131-138 (2017).

## PROTOCOLLO NMR E TRATTAMENTO DATI VERSO UNA RAPIDA E COMPLETA ETICHETTA NUTRIZIONALE PER OLII DI OLIVA

A. Rotondo,<sup>‡</sup> A. Salvo,<sup>‡</sup> G. Dugo<sup>‡†</sup>

<sup>‡</sup>Dipartimento di Scienze Biomediche, Odontoiatriche e delle Immagini Morfologiche e Funzionali (BIOMORF)Università di Messina. Viale F. Stagno d'Alcontres 31, Messina, Italy

<sup>†</sup>Università degli Studi di Messina, Sez. SASTAS Polo Annunziata, Cittadella Universitaria Viale Annunziata, 98158 Messina

E-mail: [arotondo@unime.it](mailto:arotondo@unime.it)

La grande potenzialità della risonanza magnetica nucleare nell'analisi degli olii di oliva è ben nota [1] e dipende: a) dall'assenza di veri trattamenti chimici, b) dalla costanza della risposta strumentale (buona riproducibilità), c) dalla rapida acquisizione di molti dati, d) la quantificazione viene basata su una risposta chimico-fisica dipendente solo dal momento magnetico nucleare che teoricamente rende le misure quantitative valide in senso assoluto.[2] Per il rilevamento di composti minori, i noti problemi di sensibilità imposti dal divario di rilevazione dinamico sono molto ridotti grazie a tecniche di selezione spettrale [3] o pre-saturazione multipla [4]. La gran parte degli studi NMR sfrutta le analisi statistiche multi-variate come mezzo di distinzione tra classi omologhe (cultivar, locazione) di olii; d'altra parte, da un punto di vista meramente scientifico, ogni olio è una miscela complessa di composti chimici di cui conoscere la natura e la quantità. Quest'ultimo punto ha focalizzato i nostri sforzi verso lo sviluppo di un protocollo combinato di tre esperimenti che possa fornire, in tempi relativamente rapidi, la miglior etichetta nutrizionale possibile per un olio ovviamente con le migliori possibili deviazioni standard. Gli esperimenti sono fondamentalmente: a) lo spettro protonico <sup>1</sup>H-NMR; b) lo spettro selettivo <sup>1</sup>H-NMR della zona aldeidica 8-10 ppm; c) Spettro del <sup>13</sup>C-NMR. Questi spettri si rivelano complementari in quanto lo spettro protonico è il più sensibile per i componenti principali (esteri grassi, trigliceridi, di gliceridi e squalene) pur presentando molte sovrapposizioni di segnali, lo spettro selettivo DPGSE (Fig. 1) consente la rilevazione degli importanti composti minori (polifenoli della famiglia dei secoiridoidi), lo spettro di <sup>13</sup>C, pur essendo meno sensibile, risulta molto selettivo riducendo le sovrapposizioni. La combinazione ed elaborazione della gran mole di dati ricostruisce in maniera coerente la composizione chimica dei campioni che tiene sotto controllo anche le aberrazioni sperimentali grazie al concetto che ogni composto si palesa tramite numerose evidenze strumentali (tutte le risonanze protoniche e tutte le risonanze al <sup>13</sup>C) a differenza di quanto accade nelle altre tecniche analitiche.

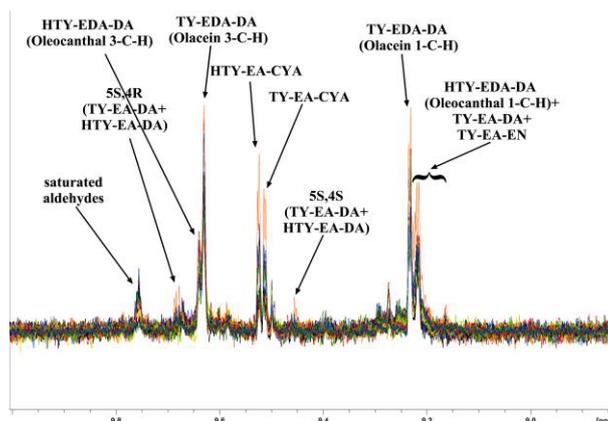


Fig. 1. Spettro selettivo  $^1\text{H}$ -DPFGSE (500 MHz) 8-10ppm di un olio di oliva con assegnazione dei segnali.

## Referenze

- [1] L. Mannina, G.mo Dugo, F. Salvo, L. Cicero, G. Ansanelli, Cristina Calcagni, and A. Segre *J. Agric. Food Chem.* **51**, 120-127 (2003).
- [2] A. Rotondo, A. Salvo, V. Gallo, L. Rastrelli, and G. Dugo *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* **119**, 1700151, (2017).
- [3] G. Dugo, A. Rotondo, D. Mallamace, N. Cicero, A. Salvo, E. Rotondo, and C. Corsaro *Physica A*, **420**, 258–264 (2015).
- [4] A. Ruiz-Aracama, E. Goicoechea, and M. D. Guillén *Food Chem.* **228**, 301–314 (2017).

# STUDIO DI FITONUTRIENTI E SOSTANZE BIOATTIVE PRESENTI NELLE FOGLIE DI OLIVI SECOLARI: UN APPROCCIO MULTIMETODOLOGICO

A. P. Sobolev,<sup>‡</sup> Z. Aturki,<sup>‡</sup> E. Donati,<sup>‡</sup> I. Nicoletti<sup>‡</sup>

<sup>‡</sup>Istituto di Metodologie Chimiche, Laboratorio di Risonanza Magnetica “Annalaura Segre”, CNR, I-00015 Monterotondo, Rome, Italy

E-mail: [anatoly.sobolev@cnr.it](mailto:anatoly.sobolev@cnr.it)

La filiera olivicola ha contribuito a creare l'identità di interi territori nel Lazio. In particolare nella Sabina sono presenti un gran numero di olivi secolari, testimonianza di un patrimonio storico e culturale che attualmente si cerca di valorizzare e conservare attraverso la loro tutela e la loro produttività.

Le foglie d'ulivo, ottenibili dal processo di potatura, sono un sottoprodotto ad alto valore aggiunto in quanto fonte di fitonutrienti (zuccheri e acidi organici) e di molecole ad alto valore antiossidante (polifenoli, vitamina E, fitosteroli). In particolare, gli estratti di foglie hanno evidenziato elevate quantità di oleuropeina e verbascoside, composti riconosciuti come importanti antiossidanti con proprietà terapeutiche.

Il contenuto di fitonutrienti e sostanze bioattive è tale che gli scarti delle potature sono attualmente presi in considerazione come possibile fonte per la produzione di alimenti funzionali e integratori [1,2].

Attraverso un approccio multimetodologico, sono stati caratterizzati i più importanti fitonutrienti e sostanze bioattive presenti nelle foglie di ulivi secolari di differenti cultivar quali Raja, Salviana, Olivastro. La spettroscopia <sup>1</sup>H NMR ad alta risoluzione [3] è stata utilizzata per ottenere il profilo metabolico degli estratti di foglie. Inoltre composti antiossidanti quali polifenoli, fitosteroli e vitamina E sono stati determinati attraverso tecniche cromatografiche ad alta risoluzione (HPLC) accoppiate a rivelatori spettrofotometrici (UV-DAD) e di spettrometria di massa (MS).

I risultati analitici ottenuti hanno dimostrato la complementarità delle due tecniche.

Particolare attenzione è stata rivolta alla preparazione del campione. Il processo di estrazione è uno step importante per ottenere un recupero quantitativo dei composti d'interesse. Sono state messe a punto due metodiche estrattive differenti per la determinazione dei composti polari e non polari.

## Referenze

- [1] N. Talhaoui, A. Taamalli, A.M. Gómez-Caravaca, A. Fernández-Gutiérrez, and A. Segura-Carretero *Food Res. Int.* **77**, 92–108 (2015).
- [2] S. Souilem, I. Fki, I. Kobayashi, N. Khalid, M. A. Neves, H. Isoda, S. Sayadi, and M. Nakajima *Food Bioprocess Technol.* **10**, 229–248 (2017).
- [3] L. Mannina, A. P. Sobolev, and S. Viel *Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc.* **66**, 1-39 (2012).

**OLI NON FILTRATI, NON SOLO UN RITORNO ALLA NATURA, MA  
ANCHE NUTRIZIONE CON PIÙ BENESSERE.**

M. C. Emanuele, S. Checcarelli

Costa d'Oro Spa, Costa d'Oro S.p.a., Via Crispino Merini, 1 – Spoleto (PG)

Email: [mc.emanuele@oliocostadoro.com](mailto:mc.emanuele@oliocostadoro.com); [s.checcarelli@oliocostadoro.com](mailto:s.checcarelli@oliocostadoro.com)

L'azienda olearia Costa d'Oro di Spoleto, una delle imprese di settore più importanti d'Italia e fra quelle maggiormente presenti sugli scaffali della distribuzione moderna, ha da tempo avviato un percorso per far riscoprire a tutti i consumatori l'olio extra vergine d'oliva non filtrato.

L'extra vergine non filtrato è sempre più riconosciuto dai consumatori, che soprattutto nelle aree vocate alla produzione di olio d'oliva associano l'aspetto torbido al prodotto appena ottenuto dal frantoio. In realtà l'extra vergine non filtrato presenta non solo un aspetto più invitante, ma una maggiore presenza di antiossidanti naturali come i polifenoli, presenti fino al 30% in più rispetto allo stesso olio filtrato. L'azione positiva di queste sostanze è stata ampiamente studiata dal comparto scientifico, che è arrivato a dimostrare che la loro presenza ha diversi caratteri funzionali: conferiscono all'olio la percezione di amaro, piccante e astringente; permettono una conservazione più lunga del prodotto; possiedono un'azione antinfiammatoria, antibatterica, antiossidante e aiutano a ridurre la pressione sanguigna. Nonostante questi effetti positivi, si preferisce in genere rinunciare ad una quota importante di polifenoli e filtrare l'olio extra vergine d'oliva, perché questa prassi è considerata la miglior soluzione per favorire la conservazione delle caratteristiche chimiche e organolettiche del prodotto durante tutta la durata della shelf life.

Recenti studi hanno al contrario dimostrato che l'olio non filtrato è migliore dello stesso olio filtrato in termini di conservazione a scaffale, se prodotto assicurandosi del corretto funzionamento e dimensionamento degli impianti. In particolare è necessario un processo produttivo che consenta di eliminare dall'olio le impurità di origine vegetale che sono origine dei problemi di conservabilità del prodotto e preservare le micromicelle acquose disperse, ricche di polifenoli idrosolubili.

## **RISONANZA MAGNETICA NUCLEARE PER DISCRIMINARE CAMPIONI DI PAPPA REALE IN FUNZIONE DELL'ORIGINE GEOGRAFICA, DEL PERIODO DI PRODUZIONE E DEL TIPO DI FIORITURE ACCESSIBILI**

P. Mazzei,<sup>‡</sup>M. Brescia,<sup>†</sup> E. Caprio,<sup>†</sup> A. Piccolo<sup>‡,†</sup>

<sup>‡</sup> Centro Interdipartimentale per la Risonanza Magnetica Nucleare per l'Ambiente, l'Agro-Alimentare ed i Nuovi Materiali (CERMANU) - Università degli Studi di Napoli Federico II, Via Università 100, 80055 Portici, Italia

<sup>†</sup> Dipartimento di Agraria, Università degli Studi di Napoli Federico II, Via Università 100, 80055 Portici, Italia

*E-mail: [pierluigi.mazzei@unina.it](mailto:pierluigi.mazzei@unina.it); [marybrescia86@libero.it](mailto:marybrescia86@libero.it); [emcaprio@unina.it](mailto:emcaprio@unina.it), [del](#)*

La pappa reale è una secrezione prodotta dalle ghiandole ipofaringee e mascellari delle api operaie e rappresenta uno dei più pregiati e nobili prodotti derivanti dall'apicoltura. Tuttavia l'introduzione illecita nel mercato agroalimentare italiano di prodotti fraudolenti di dubbia qualità ed a prezzi non concorrenziali impone l'individuazione di tecniche analitiche alternative a quelle previste dal disciplinare vigente che siano in grado di identificare, tutelare e promuovere in modo più efficace ed affidabile tale importante prodotto apistico. La spettroscopia NMR è una tecnica analitica molto valida e potente che, per la sua versatilità, si profila potenzialmente utile per l'esame di matrici alimentari di questo tipo. Ciononostante, è stata finora impiegata solo in rarissimi casi per analizzare la pappa reale, lasciando così ancora relativamente inesplorate ed inesprese le sue potenzialità. Pertanto, grazie al coinvolgimento della associazione nazionale per la produzione e la valorizzazione della pappa reale italiana, abbiamo avuto modo di analizzare campioni tracciati per mezzo di spettroscopia NMR in fase liquida combinata ad un approccio di tipo metabolomico. In particolare, abbiamo dimostrato che questo approccio permette, in modo oggettivo e riproducibile, non solo di riconoscere campioni di pappa reale in base alla loro diversa origine geografica, ma anche di discriminare nettamente i prodotti in funzione del periodo di raccolta e/o del tipo di fioriture accessibili alle api al momento della produzione.

Il nostro studio include anche i risultati preliminari relativi alla sperimentazione di tecniche NMR alternative a quelle tradizionali, quali la risonanza magnetica per immagini e la diffusione ad alta potenza. Queste ultime, oltre ad aver offerto il vantaggio di analizzare prodotti freschi non immersi in alcun solvente, hanno permesso l'ottenimento di dati diagnostici e riproducibili (i.e. coefficienti di diffusione, tempi di rilassamento) complementari a quelli metabolomici ed ulteriormente fruibili per l'identificazione del prodotto in esame.

In conclusione, la nostra indagine dimostra come diverse tecniche NMR possano fungere da mezzi analitici alternativi e/o complementari per tracciare e rintracciare la pappa reale italiana e, di conseguenza, tutelare i produttori.

# QUANTIFICAZIONE DI CARBOIDRATI IN MISCELE COMPLESSE. UNO STUDIO SUL MIELE

E. Schievano, F. Rastrelli

Dipartimento di Scienze Chimiche, Università degli studi di Padova. via Marzolo 1, Padova, Italia.

E-mail: [elisabetta.schievano@unipd.it](mailto:elisabetta.schievano@unipd.it)

Conoscere l'esatto contenuto di carboidrati è di estrema importanza per caratterizzare molte matrici alimentari. L'analisi dei carboidrati richiede procedure complesse come conseguenza della loro similarità strutturale, dell'alto numero di forme presenti, della mancanza di gruppi cromofori e di volatilità. Avere un metodo semplice e veloce per la loro determinazione che non richiede pretrattamento del campione e che nello stesso tempo garantisca specificità e un'accurata identificazione e quantificazione costituisce quindi un valido strumento per l'analisi di queste molecole.

Verrà presentato un metodo innovativo di quantificazione basato su un esperimento TOCSY selettivo, il CSSF-TOCSY [1]. La metodologia è stata sviluppata sul miele che è la più complessa matrice alimentare in composizione di carboidrati e può essere trasferita ad altre matrici come succhi di frutta, latte, marmellate ma anche a fluidi biologici. Lo studio sul miele [2] è stato condotto senza alcun pretrattamento del campione. La metodologia sviluppata, il cui schema è riportato in figura 1, consente di quantificare 23 diversi zuccheri con estrema selettività, accuratezza e precisione. Il metodo presenta un'enorme potenzialità per la identificazione di adulterazioni del miele.

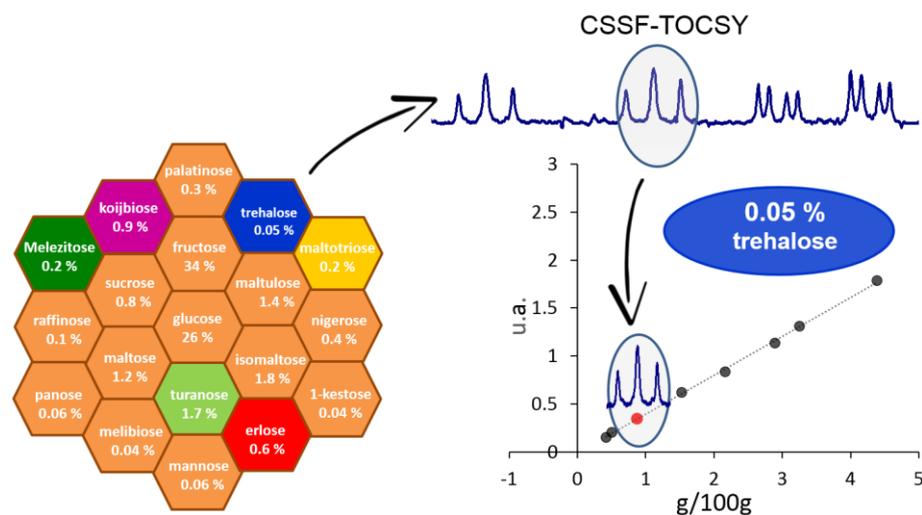


Fig. 1. Schema di quantificazione degli zuccheri su curva di calibrazione ricavata da spettri CSSF-TOCSY

## Reference

- [1] P. T. Robinson, T. N. Pham, and D. Uhrin *J. Magn. Reson.* **170**, 97-103 (2004).
- [2] E. Schievano, M. Tonoli, and F. Rastrelli *Anal. Chem.* **89**, 13405–13414 (2017).

# EntomoNMR: APPROCCIO PRELIMINARE ALLO STUDIO NMR DI NUOVI ALIMENTI A BASE DI INSETTI

R. Lamanna, F. Baldacchino, S. Dimatteo, S. Moliterni

ENEA – Dip. Sostenibilità dei Sistemi Produttivi e Territoriali - C.R. Trisaia S.S. 106 Jonica, Km 419.5 Rotondella (MT)

E-mail: raffaele.lamanna@enea.it

Gli insetti edibili costituiscono una fonte nutrizionale di elevata qualità grazie al loro contenuto in proteine, grassi, amminoacidi essenziali e fibra (chitina). L'attenzione FAO [1] e l'inserimento da parte U.E. di insetti tra i *novel foods* apre nuove prospettive al loro utilizzo. Sebbene gli alimenti a base di insetti non siano ancora presenti nei nostri supermercati, il loro studio è indispensabile soprattutto per una corretta gestione della sicurezza e della qualità, nonché per l'individuazione di tali prodotti quali ingredienti in alimenti complessi. Il profiling metabolico, molto diffuso nell'analisi degli alimenti, è tuttavia poco utilizzato nel caso degli insetti [2].

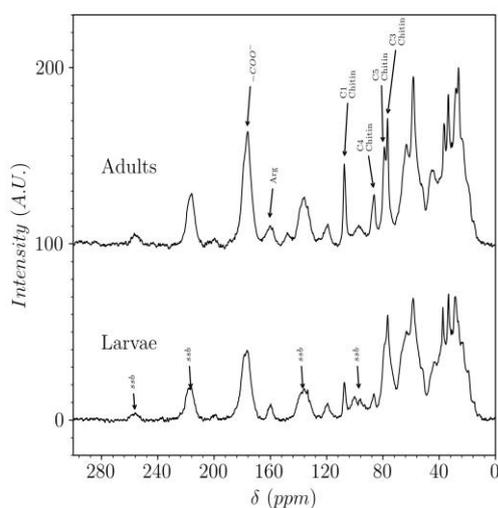


Fig 1. Spettro CPMAS di larve e adulti di *T. molitor*

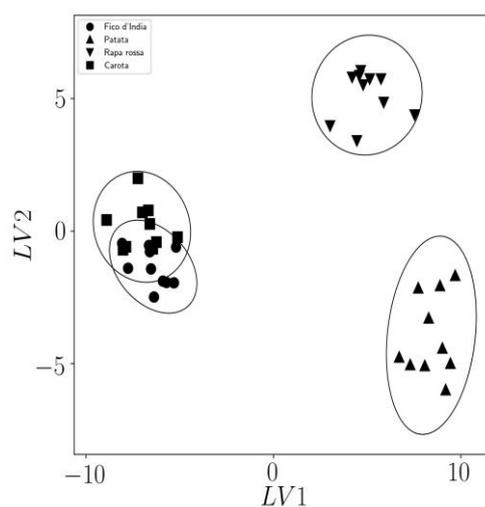


Fig 2. LDA estratti organici di larve di *T. molitor* alimentate con diversa integrazione vegetale.

Scopo del presente lavoro è una prima caratterizzazione di insetti eduli mediante NMR sia allo stato solido che in soluzione.

In particolare, spettri CPMAS sono stati utilizzati per valutare la frazione proteica e in chitina di insetti adulti e larve di *Tenebrio molitor* (Fig 1). In aggiunta, gli effetti dell'alimentazione sul contenuto metabolico delle larve sono stati studiati mediante profiling NMR sugli estratti organici ed acquosi delle larve allevate su diete differenti nella componente vegetale fresca (Fig 2).

## Referenze

- [1] A. Van Huis, J. Van Itterbeeck, H. Klunder, E. Mertens, A. Halloran, G. Muir, P. Vantomme, *Edible Insects: Future Prospects for Food and Feed*, Security. Food and Agricultural Organisation of the United Nations, Rome, p. 201 (Forestry Paper 171) 2013.
- [2] C. J. P. Snart, I. C. W. Hardy, and D. A. Barrett *Entomol. Exp. Appl.* **155**, 1-17 (2015).

# CARATTERIZZAZIONE DEL PROFILO METABOLICO DI DIVERSI COMPARTIMENTI DELLA SCIFOMEDUSA *RHIZOSTOMA PULMO*: RISULTATI PRELIMINARI

L. Del Coco,<sup>‡</sup> C. R. Girelli,<sup>‡</sup> F. Angilè,<sup>‡</sup> L. Rizzo,<sup>‡</sup> L. Basso,<sup>‡</sup>  
S. Piraino,<sup>‡</sup> § L. Stabili,<sup>‡</sup> F. P. Fanizzi<sup>‡</sup>

<sup>‡</sup> Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biologiche ed Ambientali, Università del Salento,  
Via Prov.le Lecce Monteroni, 73100 Lecce, Italy

<sup>†</sup> Istituto per l'Ambiente Marino Costiero, Unità Operativa di Supporto di Taranto, CNR,  
Via Roma 3, 74123 Taranto, Italy

<sup>§</sup> Consorzio Nazionale Interuniversitario per le Scienze del Mare (CoNISMa), Local Unit of Lecce,  
Via Prov.le Lecce-Monteroni, 73100 Lecce, Italy

Nei paesi asiatici, le meduse sono ampiamente studiate per le loro proprietà antiossidanti ed anti-ipertensive oltre che anti-iperlipidemiche, ma i loro valori nutrizionali e le caratteristiche nutraceutiche rimangono ancora poco caratterizzati [1,2].

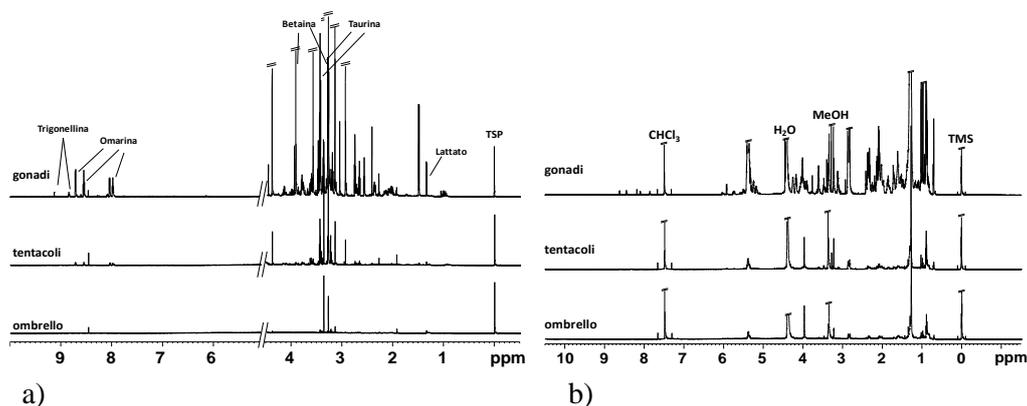


Fig. 1. Spettri <sup>1</sup>H NMR di estratti acquosi a) e lipidici b) delle tre componenti di *R. Pulmo*

In questo studio sono state caratterizzate le differenze nei profili metabolici di tre compartimenti di *Rhizostoma pulmo*, scifomedusa nota anche come “Polmone di mare” diffusa nel Mar Mediterraneo. Per ciascun compartimento, ombrello, tentacoli e gonadi femminili, sono stati analizzati i profili metabolici <sup>1</sup>H NMR degli estratti acquosi e lipidici. Lo studio degli estratti acquosi, ha evidenziato nelle gonadi femminili un più elevato contenuto di molecole con importanti attività di osmoliti, come omarina, betaina, taurina, alanina e glicina [Fig.1a]. Nell’estratto lipidico è stato osservato un maggiore contenuto relativo di acidi grassi polinsaturi (PUFA) di tipo ω-3 nelle gonadi, mentre, un più alto contenuto di acidi grassi saturi (SFA), monoinsaturi (MUFA) e di-insaturi (DUFA) caratterizza tentacoli ed ombrello [Fig.1b]. Le meduse potrebbero quindi essere considerate come fonte di numerose sostanze di interesse alimentare e nutraceutico come collagene, gelatina, oligosaccaridi, acidi grassi e composti bioattivi, inclusi peptidi bioattivi ed enzimi [3].

## Referenze

- [1] A. Leone, R. M. Lecci, M. Durante, F. Meli, and S. Piraino *Marine drugs* **13**, (2015).
- [2] N. M. Khong, F. M. Yusoff, B. Jamilah, M. Basri, I. Maznah, K. W. Chan, and J. Nishikawa, *Food Chem.* **196** (2016).
- [3] A. Leone, R. M. Lecci, M. Durante, and S. Piraino *Marine drugs*, **11**, 1728-1762 (2013).

# DINAMICA DEL PROFILO METABOLICO DEL LATTE MATERNO DI MAMME CON PARTO PRETERMINE: COLOSTRO, TRANSIZIONE E MATURO

F. C. Marincola<sup>‡</sup>, S. Corbu<sup>‡</sup>, A. Dessì<sup>†</sup>,  
V. Fanos<sup>†</sup>, E. Bertino<sup>§</sup>

<sup>‡</sup>Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche, Cittadella di Monserrato, Università di Cagliari, Cagliari

<sup>†</sup>Unità di Terapia Intensiva Neonatale, Sezione di Neonatologia e Patologia Neonatale, Università di Cagliari, Cagliari

<sup>§</sup>Dipartimento di Scienze Pediatriche e dell'Adolescenza, Università degli Studi di Torino, Torino

E-mail: [flaminia@unica.it](mailto:flaminia@unica.it)

Il latte materno rappresenta un alimento unico e insostituibile per il neonato, per i numerosi vantaggi che presenta per la sua salute sia a breve che a lungo termine. Per questo motivo l'allattamento al seno è raccomandato dall'OMS per i primi sei mesi di vita del bambino ed è consigliato anche in seguito, fino al compimento del secondo anno e oltre, se desiderato dalla coppia madre/figlio. La straordinaria inter- e intravariabilità della composizione del latte materno (cambia da mamma a mamma e anche per la stessa mamma nel tempo) fa sì che nessun latte formulato sia in grado di replicare interamente le proprietà nutrizionali di questo alimento.

Il latte materno rappresenta l'alimento di prima scelta anche per il neonato pretermine (età gestazionale, EG, tra 22 e 37 settimane) in quanto apporta benefici importanti a livello gastrointestinale, immunologico, nutrizionale e anche cognitivo che diventano indispensabili nel caso di un neonato prematuro. Quando non è disponibile latte materno fresco, la seconda scelta è rappresentata dal latte materno donato (banca del latte) la cui sua composizione differisce ovviamente da quella del latte fresco, a causa delle fasi di processamento (trasporto, stoccaggio, pastorizzazione, scongelamento). Poiché per il neonato prematuro tutti i passaggi nell'alimentazione (colostro, transizione maturo) risultano fondamentali, una conoscenza approfondita dei fattori che incidono sulla variabilità composizionale del latte può fornire utili contributi a personalizzare l'intervento nutrizionale, ponendo attenzione al monitoraggio dello stato nutrizionale.

In questo lavoro presentiamo i risultati di uno studio metabolomico condotto su campioni di latte materno di 25 mamme con parto estremamente pretermine (EG 25÷28 settimane), molto pretermine (EG 29÷31 settimane) e moderatamente pretermine (EG 32÷34 settimane) raccolti a diversi stadi di allattamento: colostro (3-6 giorni post-partum), transizione (7-14 giorni post-partum) e maturo (16-26 giorni post-partum). La composizione del latte è stata analizzata sia in funzione dell'età gestazionale che di quella postnatale usando tecniche supervisionate e non. In accordo con quanto già osservato per il latte materno di mamme con parto a termine [1,2], il metaboloma del latte prematuro è risultato influenzato dall'età postnatale e dal fenotipo secretore caratterizzante la presenza di specifici oligosaccaridi fucosilati. Differentemente, non sono stati trovati significativi cambiamenti in funzione dell'età gestazionale.

## Referenze

- [1] J.T. Smilowitz, A. O'Sullivan, D. Barile, J.B. German, B. Lonnerdal, C.M. Slupsky, The human milk metabolome reveals diverse oligosaccharide profiles, *J. Nutr.* **143** 1709-1718 (2013).
- [2] A.R. Spevacek, J.T. Smilowitz, E.L. Chin, M.A. Underwood, J.B. German, C.M. Slupsky, Infant maturity at birth reveals minor differences in the maternal milk metabolome in the first month of lactation, *J. Nutr.* **145** 1698-1708 (2015).

## **eALIERB: LA PIATTAFORMA WEB**

A. Patsilidakos,<sup>‡</sup> C. Ingallina,<sup>‡</sup> M. Arena,<sup>‡</sup> L. Mannina,<sup>‡†</sup> R. Ragno<sup>‡</sup>

<sup>‡</sup>Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Sapienza Università di Roma, P.le Aldo Moro 5,  
00185 Rome, Italy

<sup>†</sup>Istituto di Metodologie Chimiche, Laboratorio di Risonanza Magnetica “Annalaura Segre”,  
CNR, I-00015 Monterotondo, Rome, Italy

E-mail: alexandros.patsilidakos@uniroma1.it

Il progetto e-ALIERB si propone di allestire e rendere disponibile una struttura OPEN LAB multidisciplinare volta alla caratterizzazione e valorizzazione dei prodotti alimentari ed erboristici con particolare riguardo a quelli provenienti dal territorio laziale. La costruzione di una piattaforma web destinata a gestire informazioni relative a prodotti alimentari/erboristici e sostanze di origine naturale prevede l'analisi e lo sviluppo di soluzioni software e hardware per affrontare diversi aspetti necessari allo storage, all'elaborazione, all'interrogazione di informazioni che comprendono sia dati chimico-fisici, merceologici e biologici. Pertanto, sono state sviluppate soluzioni per rendere *user-friendly* l'interfaccia utente, con sezioni dedicate ai metodi di analisi, alla descrizione e caratterizzazione degli alimenti oggetto di studio. Inoltre è stato sviluppato uno schema del *database* basato sulla normalizzazione delle tabelle al fine di eliminare la ridondanza informativa e ottimizzare la manutenzione e la performance di archiviazione, ricerca, accessibilità, analisi e integrazione dei dati. Il *look and feel* del portale è basato sulle attuali tendenze e punta a rendere l'esperienza utente immediata con una struttura grafico-funzionale dei contenuti tale da rendere i dati in input ed in output facilmente accessibili. La realizzazione del progetto ha richiesto l'apporto di customizzazioni sempre più mirate. Pertanto, è stata effettuata la scelta operativa di implementare la piattaforma nel linguaggio di programmazione Python, permettendo l'accesso ad una vasta collezione di librerie scientifiche come numpy, scipy, pandas. Il database è di tipo relazionale SQL e si basa su PostgreSQL. La piattaforma è da intendersi come una banca dati che rappresenterà un riferimento sia per il panorama scientifico che per il mondo commerciale.

## CARATTERIZZAZIONE E VALORIZZAZIONE DEGLI ALIMENTI CON *e*ALIERB-OPENLAB: IL CASO DEL PEPERONE CORNETTO DI PONTECORVO DOP

C. Ingallina,<sup>‡</sup> A. P. Sobolev,<sup>†</sup> S. Circi,<sup>‡</sup> N. Proietti,<sup>†</sup> D. Capitani,<sup>†</sup> M. Locatelli,<sup>§</sup> S. Carradori,<sup>§</sup> R. Preti,<sup>¶</sup> G. Vinci,<sup>¶</sup> A. Vitalone,<sup>\*</sup> G. Mazzanti,<sup>#</sup> A. Di Sotto,<sup>#</sup> M. E. Crestoni,<sup>‡</sup> B. Chiavarino,<sup>‡</sup> S. Fornarini,<sup>‡</sup> B. Botta,<sup>‡</sup> L. Mannina<sup>††</sup>

<sup>‡</sup> Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Sapienza Università di Roma, P.le Aldo Moro 5, 00185 Roma

<sup>†</sup> Istituto di Metodologie Chimiche, Laboratorio di Risonanza Magnetica “Annalaura Segre”, CNR, I-00015 Monterotondo, Rome, Italy

<sup>§</sup> Dipartimento di Farmacia, Università di Chieti-Pescara “G. d’Annunzio”, Via dei Vestini 31, 66100, Chieti, Italy

<sup>¶</sup> Dipartimento di Management, Laboratorio di Merceologia, Sapienza Università di Roma, Via del Castro Laurenziano 9, 00161 Rome, Italy

<sup>#</sup> Dipartimento di Fisiologia e Farmacologia “V. Ersparmer”, Sapienza Università di Roma, P.le Aldo Moro 5, 00185 Rome, Italy

E-mail: cinzia.ingallina@uniroma1.it

Il progetto “*e*ALIERB: un OPEN LAB per caratterizzare e valorizzare i prodotti alimentari ed erboristici del territorio laziale” finanziato dalla Regione Lazio e terminato il 30 aprile 2018 ha avuto lo scopo di allestire e rendere disponibile a piccolo e medie imprese una piattaforma “multi competente” in grado di valorizzare i prodotti alimentari ed erboristici con particolare riguardo a quelli provenienti dal territorio laziale. Infatti, sebbene la qualità dei prodotti agro-alimentari sia spesso definita attraverso parametri di valutazione morfologici (colore, forma, aromi etc), la richiesta del consumatore si sta indirizzando sempre più verso prodotti che possiedano un valore nutrizionale e salutistico e un basso impatto ambientale (prodotti funzionali e nutraceutici). In questo contesto, la caratterizzazione analitica fornita da OPENLAB, potrebbe conferire un valore aggiunto alle produzioni, promuovendone le proprietà funzionali derivanti dal contenuto in composti bioattivi.

Nell’ambito del progetto sono stati analizzati diversi prodotti, di cui il prodotto pilota è stato il Peperone Cornetto di Pontecorvo DOP. Lo studio di questo frutto è stato condotto analizzando e confrontando il prodotto coltivato in serra e in cielo aperto e le differenti parti del prodotto stesso (cuticola, polpa e semi). I campioni sono stati sottoposti a diverse procedure estrattive, al fine di caratterizzare al meglio la composizione fitochimica. Gli estratti sono stati analizzati attraverso metodologie “untargeted” (NMR e MS) e “targeted” (HPLC e HPTLC) che hanno permesso di delineare il profilo metabolico e le variazioni di composizione tra le varie parti del frutto e tra il frutto coltivato in campo aperto e in serra [1]. In particolare, le analisi NMR e MS hanno evidenziato un contenuto una composizione in metaboliti primari simili nei peperoni da coltivazione in serra e in cielo aperto. La valutazione di qualità e freschezza del prodotto è stata ottenuta attraverso la delineazione del contenuto in ammine biogene e micotossine mediante metodologie rispettivamente HPLC-FLD e HPLC-MS [1]. Infine sono stati condotti differenti test biologici sugli estratti organici al fine di valutarne le proprietà antiossidanti, antimutagene, antimicotiche e ipoglicemizzanti [1,2].

La combinazione delle tecniche utilizzate ha permesso di delineare un profilo completo dell'alimento. I risultati ottenuti mostrano che la coltivazione in serra rappresenta una valida alternativa rispetto a quella tradizionale a cielo aperto, consentendo da un lato di aumentare la produzione e dall'altro di preservare le principali caratteristiche del Peperone di Pontecorvo DOP. Inoltre, i prodotti considerati di scarto, come buccia e semi, sono potenzialmente utili per l'industria alimentare per estrarre i composti salutari: gli estratti hanno infatti evidenziato proprietà antiossidanti, ipoglicemizzanti e chemopreventive.

## Referenze

- [1] A. P. Sobolev, L. Mannina, D. Capitani, G. Sanzò, C. Ingallina, B. Botta, S. Fornarini, M. E. Crestoni, B. Chiavarino, S. Carradori, M. Locatelli, A. M. Giusti, G. Simonetti, G. Vinci, R. Preti, C. Toniolo, M. Reverberi, M. Scarpari, A. Parroni, L. Abete, F. Natella and A. Di Sotto *Food Chem.*, **255**, 120-131 (2018).
- [2] A. Di Sotto, M. Vecchiato, L. Abete, C. Toniolo, A. M. Giusti, L. Mannina, M. Locatelli, M. Nicoletti and S. Di Giacomo *J. Funct. Foods*, **40**, 679-691(2018).

## CARATTERIZZAZIONE DI POMODORI DEL BASSO LAZIO ATTRAVERSO UN APPROCCIO MULTIMETODOLOGICO

S. Circi,<sup>‡</sup> C. Ingallina,<sup>‡</sup> A. Sobolev,<sup>†</sup> D. Capitani,<sup>†</sup> M. Rapa,<sup>§</sup> G. Vinci,<sup>§</sup>  
S. Di Giacomo,<sup>¶</sup> A. Disotto,<sup>¶</sup> R. Mancinelli,<sup>#</sup> L. Mannina<sup>‡,†</sup>

<sup>‡</sup> Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Sapienza Università di Roma, Piazzale Aldo Moro 5, I-00185 Rome, Italy Email: [simone.circi@uniroma1.it](mailto:simone.circi@uniroma1.it); [cinzia.ingallina@uniroma1.it](mailto:cinzia.ingallina@uniroma1.it); [luisa.mannina@uniroma1.it](mailto:luisa.mannina@uniroma1.it)

<sup>†</sup> Istituto di Metodologie Chimiche, CNR, Laboratorio di Risonanza Magnetica “Annalaura Segre”, via Salaria km 29.300, I-00015 Monterotondo, Italy Email: [anatoly.sobolev@cnr.it](mailto:anatoly.sobolev@cnr.it); [donatella.capitani@cnr.it](mailto:donatella.capitani@cnr.it)

<sup>§</sup> Dipartimento di Management, Sapienza Università di Roma, Via del Castro Laurenziano 9, I-00161 Rome, Italy Email: [mattia.rapa@uniroma1.it](mailto:mattia.rapa@uniroma1.it); [giuliana.vinci@uniroma1.it](mailto:giuliana.vinci@uniroma1.it)

<sup>¶</sup> Dipartimento di Fisiologia e Farmacologia “V. Erspamer”, Sapienza Università di Roma, Piazzale Aldo Moro 5, I-00185 Rome, Italy Email: [silvia.digiaco@uniroma1.it](mailto:silvia.digiaco@uniroma1.it); [antonella.disotto@uniroma1.it](mailto:antonella.disotto@uniroma1.it)

<sup>#</sup> Dipartimento di Scienze Anatomiche, Istologiche, Medico Legali e dell’Apparato Locomotore, Sapienza Università di Roma, Piazzale Aldo Moro 5, I-00185 Roma, Italia Email: [romina.mancinelli@uniroma1.it](mailto:romina.mancinelli@uniroma1.it)

Obiettivo del presente lavoro è stato caratterizzare il profilo fitochimico e la potenziale attività biologica di differenti varietà di pomodoro provenienti dal territorio laziale di Fondi (Latina). Questo studio si inserisce nell’ambito del progetto di ricerca *e-ALIERB-OPEN LAB\**, volto a promuovere la tipicità dei prodotti alimentari ed erboristici del Lazio al fine di favorire lo sviluppo economico ed aziendale regionale [1]. Nello specifico, sono state analizzate le seguenti varietà di pomodoro: San Marzano, Torpedino, Fiaschetta, Bamano, Dolce Miele, Confettino Rosso e King Creole.

I frutti sono stati sottoposti ad estrazione mediante il metodo Bligh-Dyer. Gli estratti essiccati sono stati caratterizzati dal punto di vista metabolomico mediante Risonanza Magnetica protonica ed è stato determinato il contenuto di polifenoli totali, tannini e flavonoidi mediante analisi spettrofotometrica. È stato valutato inoltre il contenuto di ammine biogene al fine di determinare qualità e freschezza dei campioni in esame. Per quanto riguarda gli studi di attività biologica, sono state valutate le attività citoprotettiva ed antiossidante della varietà Torpedino, un pomodoro ibrido locale noto come “mini San Marzano”.

L’analisi del profilo metabolico effettuata attraverso la spettroscopia NMR ha evidenziato la presenza di diverse classi di metaboliti primari, in particolare amminoacidi, carboidrati, acidi organici, nucleosidi, lipidi e steroli. Le varietà San Marzano, Torpedino e Fiaschetta sono risultate mediamente più ricche di amminoacidi mentre le varietà Bamano e Dolce Miele sono risultate essere le più ricche per il contenuto di carboidrati. Dal confronto delle varietà studiate sia nella forma acerba che matura (San Marzano, Torpedino e Fiaschetta) si può affermare che con la maturazione si verifica un tendenziale aumento della concentrazione della maggior parte dei metaboliti, ad eccezione dei quantitativi di acido citrico e di acido malico che tendono invece a diminuire.

L’analisi dei polifenoli totali, tannini e flavonoidi ha evidenziato una peculiare composizione della varietà Torpedino rispetto alla San Marzano, con differenze tra le forme acerbe e mature: i livelli di polifenoli sono più elevati negli estratti da frutto acerbo, mentre i flavonoidi sono superiori nel frutto maturo. Gli estratti ottenuti dal

frutto acerbo della Torpedino sono risultati più efficaci come scavenger del radicale ABTS, come chelanti e riducenti degli ioni ferrici e come inibitori della perossidazione lipidica. Negli studi di citoprotezione, gli estratti idroalcolici della Torpedino sono risultati attivi nel prevenire il danno ossidativo indotto da tBOOH nei sistemi cellulari saggiati, con un effetto citoprotettivo di circa il 30 %, paragonabile a quello della quercetina, utilizzata come controllo positivo.

Lo studio delle ammine biogene ha evidenziato come questi composti possano essere indice del grado di maturazione dei frutti. Infatti, in tutte le cultivar si è riscontrata una concentrazione maggiore di ammine biogene per i frutti maturi rispetto a quelli acerbi. Le ammine biogene determinate sono:  $\beta$ -fenilettilammina, putrescina, cadaverina, istamina, tiramina, serotonina, spermina e spermidina. Tra queste la tiramina e l'istamina hanno effetti negativi sulla salute umana; di questi due composti la tiramina non è stata rilevata in nessun campione, invece l'istamina non è stata rilevata solo nei campioni di Bamano. La serotonina, un importante neurotrasmettitore con effetti positivi sulla salute umana, è risultata presente in tutti i campioni di pomodoro maturi ed in concentrazioni più alte nella cultivar Confettino Rosso.

\* “e-ALIERB: un OPEN LAB per caratterizzare e valorizzare i prodotti alimentari ed erboristici del territorio laziale” (FILAS-RU-2014-1157, Codice CUP B82I15003570002)

## Referenze

[1] A. P. Sobolev, L. Mannina, D. Capitani, G. Sanzò, C. Ingallina, B. Botta, S. Fornarini, M. E. Crestoni, B. Chiavarino, S. Carradori, M. Locatelli, A. M. Giusti, G. Simonetti, G. Vinci, R. Preti, C. Toniolo, M. Reverberi, M. Scarpari, A. Parroni, L. Abete, F. Natella and A. Di Sotto *Food Chem.* **255**, 120-131 (2018).

# MONITORAGGIO IN TEMPO REALE DEL GRADO DI TOSTATURA DEL CAFFÈ MEDIANTE SPETTROSCOPIA NIR E ANALISI MULTIVARIATA DEI DATI

F. Savorani, A. Giraud, F. Geobaldo

Dipartimento Scienza Applicata e Tecnologia, Politecnico di Torino, C.so Duca degli Abruzzi 24, I-10129 Torino, Italia.

E-mail: francesco.savorani@polito.it

La tostatura rappresenta uno step fondamentale nel processo produttivo del caffè, in quanto ne favorisce lo sviluppo del colore e delle componenti aromatiche, che sono parametri fondamentali da considerare nell'ambito del controllo qualità [1]. Pertanto, il processo di tostatura richiede un accurato monitoraggio a livello industriale, al fine di soddisfare le richieste dei consumatori, volte all'ottenimento di un livello elevato e costante del prodotto finito. Il grado di tostatura del caffè è un parametro efficace per valutare in modo rapido la performance globale del processo, e può essere determinato utilizzando la spettroscopia NIR [2]. L'obiettivo del presente studio è valutare l'applicabilità della spettroscopia NIR, combinata con l'analisi multivariata, nel descrivere l'andamento del processo di tostatura del caffè in tempo reale. Gli spettri sono stati acquisiti durante la tostatura del caffè introducendo una sonda NIR (Emission head, Bruker Optics, Germany) in un tostino da laboratorio (Probat, Germany), all'interno del quale sono state condotte 33 prove sperimentali considerando quattro diverse temperature di tostatura (155-160-170-180°C) e la sola specie Arabica, per un totale di circa 1800 spettri. Fra i diversi metodi indagati per il pretrattamento dei segnali spettrali, SNV si è rivelato il più idoneo. Successivamente, l'elaborazione dei dati spettrali è stata effettuata utilizzando due tecniche chemiometriche, PCA e *Multivariate Curve Resolution* (MCR). Entrambe le tecniche hanno consentito di ottenere una valutazione dettagliata delle dinamiche del processo di tostatura del caffè così come mostrato in Fig. 1. In seguito ad una ulteriore ottimizzazione dei modelli, il metodo proposto potrebbe essere implementato su scala industriale, con l'obiettivo di controllare in modo non invasivo e completamente automatizzato le condizioni di tostatura del caffè in tempo reale.

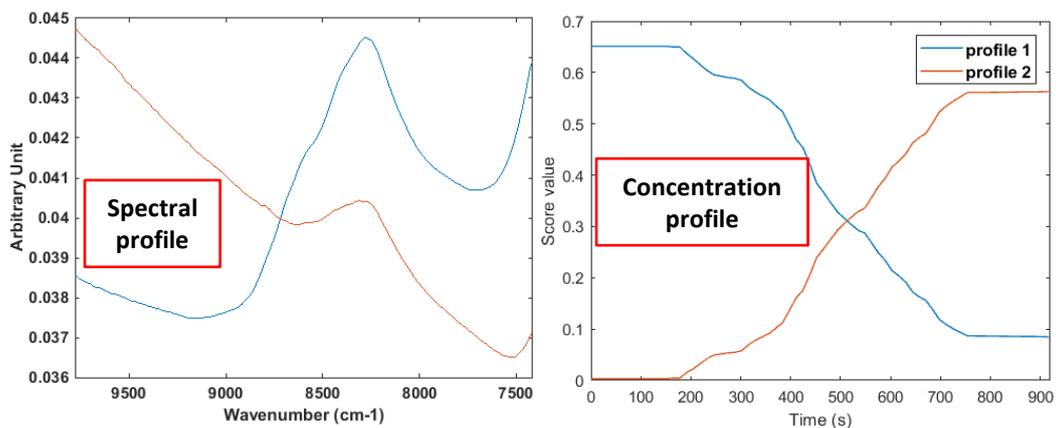


Fig. 1. Risultati dell'analisi MCR della matrice degli spettri NIR acquisiti per un singolo batch di tostatura la quale ha evidenziato la presenza di due componenti spettrali ed i relativi andamenti di concentrazione nel tempo.

## Referenze

- [1] H. M. C. de Abreu, P.M. Nobile, M. M. Shimizu, et al. *Braz. J. Bot.*, **35**(4), (2012).
- [2] E. Bertone, A. Venturello, A. Giraudo et al. *Food Control*. **59**, 683-689 (2016).

## SVILUPPO DI RADICI DI CAROTA VIOLA E ARANCIONE VALUTATO MEDIANTE RISONANZA MAGNETICA NUCLEARE

F. Sciubba,<sup>‡</sup> A. Tomassini,<sup>‡</sup> M. E. Di Cocco,<sup>‡</sup> G. Giorgi,<sup>‡</sup>  
M. Delfini,<sup>‡</sup> W. Aureli,<sup>†</sup> A. Micheli<sup>‡</sup>

<sup>‡</sup>Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Roma "La Sapienza", P.le Aldo Moro 5, 00185 Roma  
<sup>†</sup> R&D, Aureli Mario S.S. Agricola, Via Mario Aureli 7, 67050 Ortucchio (Aq)

E-mail: fabio.sciubba@uniroma1.it

La carota (*Daucus carota* L.) è una radice della famiglia delle *Apiaceae*. È una delle colture vegetali più importanti e più economiche al mondo. Può essere consumata tal quale, sotto forma di succhi o essere la base di prodotti più elaborati. Dal punto di vista nutrizionale, le carote non apportano una quantità significativa di calorie (43 kcal per 100g), ma contengono numerose specie chimiche con documentate proprietà antinfiammatorie, antiossidanti, antimicrobiche, antivirali e antitumorali. Storicamente, sono state coltivate diverse varietà di carota, che in genere si differenziano in base al colore [1], ed è importante sottolineare come questo non sia un parametro puramente estetico, ma che abbia una correlazione diretta con le proprietà nutrizionali dell'alimento. Infatti, mentre le carote arancioni contengono principalmente carotenoidi come agenti coloranti, le carote nere (*Daucus carota* ssp. *Sativus* var. *Atrorubens*) contengono antociani e altri composti biologicamente attivi, circa 9 volte più abbondanti che non nelle arancioni [2]. Questo è molto importante poiché il cibo ad alto contenuto di flavonoidi e antiossidanti è stato accettato dalla comunità scientifica come un buon punto di partenza per diete in grado di prevenire l'insorgere di diverse malattie, e ciò ha reso le carote oggetto di studi spettroscopici per quanto concerne la loro composizione chimica [3,4].

Lo sviluppo delle radici è un processo che, come osservato nel caso della maturazione dei frutti, può influire notevolmente proprio sulla composizione fitochimica dell'alimento. Studi sulla maturazione della frutta hanno dimostrato che il tempo di raccolta può essere adattato per tener conto del potenziale effetto sulla salute dei consumatori dei componenti che aumentano o diminuiscono durante i tempi di sviluppo [5]. Inoltre, in altri studi è stato anche evidenziato che cultivar della stessa specie vegetale si sviluppano con velocità diverse anche quando il tempo di maturazione globale è paragonabile [6].

Mentre il processo di maturazione è ben documentato per la frutta, lo sviluppo delle radici non è stato approfondito alla stessa maniera, e come tale è richiesta un'indagine dettagliata dei cambiamenti della composizione chimica.

Nel presente studio, è stata impiegata la spettroscopia NMR (accoppiata ad analisi statica multivariata PLS) per monitorare lo sviluppo di due cultivar di carota, nera e arancione, dal mese di settembre a novembre. Inoltre, poiché è risaputo che l'eccessivo sviluppo delle carote, in particolare della varietà nera, può dare origine a un gusto amaro nel raccolto, lo sviluppo di questa cultivar è stato esteso al mese di dicembre per analizzare meglio la base chimica di questo fenomeno.

## Referenze

- [1] S. A. Arscott e S. A. Tanumihardjo *CRFSFS* **9**, 223-239 (2010)
- [2] A. Smeriglio, M. Denaro, D. Barreca, V. D'Angelo, M.P. Germanò e D. Trombetta *Fitoterapia* **124**, 49-57 (2018)
- [3] A. Cazor, C. Deborde, A. Moing, D. Rolin, H. This *J. Agric. Food Chem.* **54**, 4681-4686 (2006)
- [4] A. Tomassini, F. Sciubba, M. E. Di Cocco, G. Capuani, M. Delfini, W. Aureli e A. Miccheli *J. Agric. Food Chem.* **64**, 5284-5291 (2016)
- [5] D. Capitani, L. Mannina, N. Proietti, A. P. Sobolev, A. Tomassini, A. Miccheli, M. E. Di Cocco, G. Capuani, R. De Salvador e M. Delfini, *Talanta* **82**, 1826-1838 (2010)
- [6] F. Sciubba, D. Avanzato, A. Vaccaro, G. Capuani, M. Spagnoli, M. E. Di Cocco, I. N. Tzareva e M. Delfini *Nat. Prod. Res.* **31**, 765-772 (2017).

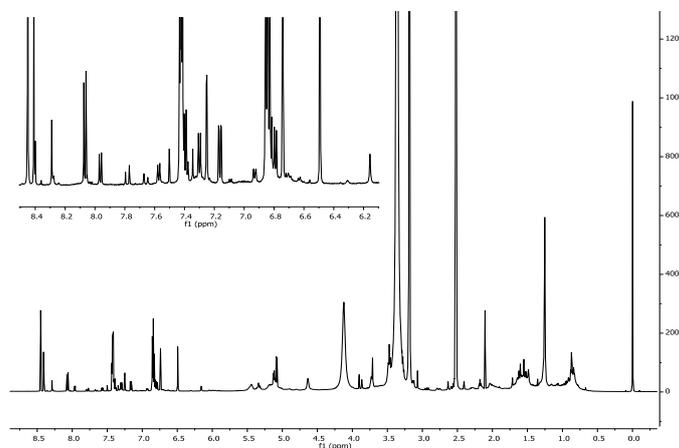
# DETERMINAZIONE SIMULTANEA DEI PRINCIPI ATTIVI DI *GLYCINE* *MAX* L. E *HUMULUS LUPULUS* L. IN INTEGRATORI ALIMENTARI

L. Marchetti, D. Bertelli

‡ Dipartimento di Scienze della Vita, Via Campi 103, Modena, Italy

E-mail: lucia.marchetti@unimore.it

Gli isoflavoni della soia e i prenilflavonoidi del luppolo sono composti ad elevata affinità per i recettori degli estrogeni e per questo sono le sostanze naturali più utilizzate in integratori per contrastare la sintomatologia tipica del periodo menopausale e post-menopausale. Questo tipo di prodotti spesso non riportano il titolo esatto in principi attivi che può variare anche considerevolmente in dipendenza di diversi fattori [1]. Il facile ricorso a queste formulazioni senza obbligo di prescrizione medica comporta un elevato rischio di sovradosaggi e potenziali effetti collaterali. Inoltre non essendo sottoposti alle procedure di controllo tipiche dei farmaci, gli integratori sono esposti ad un maggior rischio di adulterazioni. Da ciò deriva la necessità di efficaci approcci analitici per il loro controllo [2]. L'analisi d'integratori multicomponente richiede diverse tecniche analitiche a causa della natura chimica spesso molto diversa degli attivi presenti. La qNMR applicata in questo ambito è molto vantaggiosa permettendo la determinazione di molti composti strutturalmente diversi in un unico esperimento senza fasi preliminari di purificazione del campione. Estratti metanolic di diverse formulazioni commerciali a base di luppolo e soia, reperibili nella grande distribuzione, sono stati analizzati e per ottenere la completa interpretazione dello spettro si è fatto ricorso anche a sequenze di correlazione bidimensionali (COSY, HSQC, HMBC) e  $^{13}\text{C}$ , JRes. I picchi più risolti nella zona aromatica tra 6.0 e 8.5 ppm, sono stati assegnati ai composti di interesse e successivamente quantificati con la tecnica Bruker-ERETIC2.



## Referenze

- [1] K. Setchell, N. Brown, P. Desai, L. Zimmer-Nechemias, B. E. Wolfe, W. T. Brashear, A. S. Kirschner, A. Cassidy, and J. E. Heubi *J. Nutr.* **131**, 1362S-1375S (2001).  
[2] Y. Liu, F. Lu, *Reviews in Analytical Chemistry* (2017)

## STUDIO <sup>1</sup>H NMR DEI PROFILI METABOLOMICI DI VINI TRATTATI CON METODO DEL RIPASSO CON VINACCE PER LA RIMOZIONE DI OTA

L. Del Coco,<sup>‡</sup> L. Gambacorta,<sup>†</sup> M. Solfrizzo,<sup>†</sup> F. P. Fanizzi <sup>‡</sup>

<sup>‡</sup>Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biologiche ed Ambientali, Università del Salento, Lecce,  
laura.delcoco@unisalento.it, fp.fanizzi@fanizzi@unisalento.it;

<sup>†</sup>Istituto di scienze delle produzioni alimentari (ISPA-CNR), Bari, lucia.gambacorta@ispa.cnr.it,  
michele.solfrizzo@ispa.cnr.it

L'ocratossina A (OTA) è la micotossina più diffusa nei vari prodotti agroalimentari la cui formazione è dovuta a diverse specie fungine del genere *Aspergillus* e *Penicillium*, in particolare *A. carbonarius*. Quest'ultima è stata identificata come la specie fungina maggiormente responsabile della contaminazione da OTA delle uve, vini, succhi d'uva e uva passa. Di particolare rilevanza è la contaminazione delle uve rosse coltivate in alcune aree geografiche ad elevato rischio di infezione da *A. carbonarius* che colonizza le uve durante le fasi di maturazione. La presenza e la diffusione di questo fungo e il conseguente accumulo di OTA nei vigneti è fortemente influenzata dall'area geografica, da fattori climatici e ambientali, dalla suscettibilità varietale e da eventuali lesioni degli acini che favoriscono l'ingresso e la diffusione del fungo nelle uve [1].

Con il Regolamento CE n.123/2005, il limite massimo consentito è stato fissato a 2 µg/L per vino, mosto e succo d'uva [2], e pertanto sono state studiate diverse strategie per il controllo e la riduzione della contaminazione di OTA, sia in campo (con l'uso di fungicidi e agenti di biocontrollo) che in cantina (con l'uso di carbone attivo enologico e tecniche di ripasso). Il ripasso breve di mosti/vini contaminati su vinacce fresche o stabilizzate è un approccio naturale che rimuove l'OTA conservando o migliorando le caratteristiche organolettiche di mosti/vini trattati [3]. Recentemente sono stati sviluppati un prototipo ed un processo di stabilizzazione delle vinacce, validati anche in cantina, che permettono di eseguire in automatico il processo di ripasso in sole 5 ore [4]. In questo studio è stata analizzata la variazione, rispetto al controllo (A), dei profili metabolomici (ottenuti mediante analisi <sup>1</sup>H NMR) di vini Primitivo trattati con metodo del ripasso su vinacce sempre di cultivar Primitivo (fresche, B, stabilizzate, C) e su vinacce fresche di Aglianico (D) o trattati con carbone attivo enologico (E).

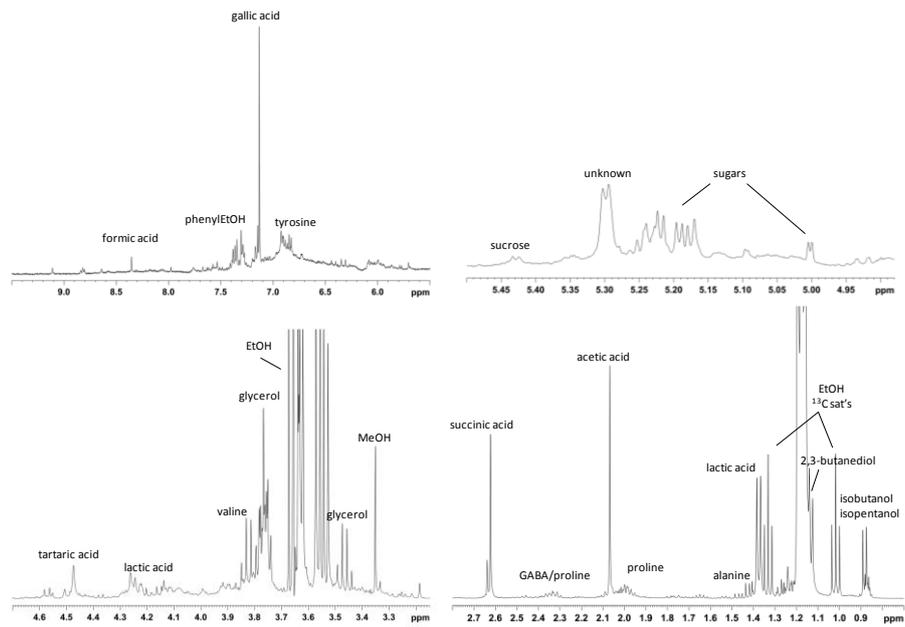


Fig. 1. Spettro  $^1\text{H-NMR}$  di un campione di vino Primitivo di Gioia Del Colle (Ba).

## Referenze

- [1] EFSA. 2006. Opinion of the scientific panel on contaminants in the food chain on a request from the commission related to ochratoxin A in food. *EFSA J.* 365:1–56.
- [2] European Commission. Commission Regulation (EC) No 123/2005 of 26 January 2005 amending Regulation (EC) No 466/2001 as regards ochratoxin A. *Off. J. Eur. Union* 2005, L25, 3–5.
- [3] M. Solfrizzo, G. Avataggiato, G. Panzarini, and A. Visconti *JAF C* **58**, 317-323 (2010).
- [4] M. Solfrizzo, G. Perrone, L. Piemontese, R. Zivoli, M. Ferrara, L. Gambacorta, D. Magistà, R. Fracchiolla, and R. Leo (2016). Processo e impianto per il trattamento di mosti e vini. Consiglio Nazionale delle Ricerche e Industrie Fracchiolla SpA. Domanda brevetto numero: 102016000083162; Data di presentazione: 05/08/2016.

## METABOLOMICA BASATA SU SPETTROSCOPIA NMR PER L'INDIVIDUAZIONE DI BIOMARCATORI URINARI DI EFFETTO E DI TRASFORMAZIONE METABOLICA DI FARMACI ANTI-HCV

M. Arena,<sup>‡</sup> O. Giampaoli,<sup>‡</sup> A. Tomassini,<sup>‡</sup> G. Capuani,<sup>‡</sup>  
E. Biliotti,<sup>†</sup> G. Taliani,<sup>†</sup> A. Miccheli<sup>‡</sup>

<sup>‡</sup>Dipartimento di Chimica, Sapienza Università di Roma, P.le Aldo Moro 5, 00185 Roma.  
mattarena22@gmail.com

<sup>†</sup>Dipartimento di Medicina Clinica, Sapienza Università di Roma, P.le Aldo Moro 5, 00185 Roma.  
gloria.taliani@uniroma1.it

Le infezioni causate dal virus dell'epatite C (HCV, Hepatitis C Virus) rappresentano un problema di salute pubblica sia nei Paesi in via di sviluppo sia in quelli sviluppati.

Secondo recenti stime circa 170 milioni di persone nel mondo sono affetti da HCV, 350 mila delle quali muoiono ogni anno a causa di complicazioni. L'infezione può infatti avere una manifestazione acuta che rappresenta la forma meno grave di epatite da virus C, spesso inapparente. Tuttavia, nel 70% dei casi può diventare persistente e dar luogo a epatite cronica attiva che culmina in cirrosi e in alcuni casi in carcinoma epatocellulare.

Studi recenti di metabolomica basata su spettroscopia NMR sono stati condotti sul siero di pazienti con cirrosi indotta dal virus dell'epatite B (HBV) o dal virus dell'epatite C (HCV), al fine di evidenziare con successo profili metabolici plasmatici discriminanti tra soggetti cirrotici e sani. La metabolomica NMR è stata applicata anche su urine di pazienti con HBV, al fine di evidenziare differenze del pattern metabolico urinario tra soggetti HBV positivi affetti da cirrosi, pazienti con epatite B cronica (HBVc) e individui sani.

Nel presente studio è stato analizzato il profilo metabolico urinario di soggetti con cirrosi epatica dipendente da infezione HCV, mediante spettroscopia NMR. Il principale obiettivo del lavoro è stato quello di evidenziare alterazioni metaboliche risultanti dalla patologia e valutare effetti metabolici della negativizzazione da HCV, a seguito di terapie specifiche antivirali di miscele di farmaci inibitori della replicazione virale. A tal fine è stato condotto uno studio su urine di 42 soggetti maschi a digiuno, di età compresa tra 43 e 82 anni, di cui 20 soggetti sani (Ctrl) e 22 affetti da cirrosi da HCV. I pazienti sono stati esaminati allo stadio BT<sub>0</sub> (Before Treatment t<sub>0</sub>), prima dell'assunzione della terapia, e allo stadio EOT (End Of Treatment), al termine della terapia di otto settimane coincidente con la negativizzazione del test HCV.

L'analisi <sup>1</sup>H-NMR mono- e bi-dimensionale del biofluido ha permesso la determinazione qualitativa e quantitativa dei metaboliti a basso peso molecolare, compresi gli intermedi metabolici dei farmaci anti-HCV ad eliminazione urinaria (ribavirin e sofosbuvir). Il confronto tra il profilo metabolico urinario di pazienti con cirrosi epatica HCV (genotipo 1a e 1b) e soggetti sani è stato effettuato su 53 metaboliti, di cui 46 sono stati identificati, e 7 sono stati classificati come *unassigned signals*. Il confronto dei dati ottenuti nei tre gruppi sperimentali (Ctrl, pazienti BT<sub>0</sub> e EOT) mediante analisi multivariata PLS-DA ha consentito di distinguere le informazioni biochimiche relative alle variazioni metaboliche indotte dalla cirrosi da quelle inerenti alla fase attiva dell'infezione HCV. In aggiunta, è stato possibile evidenziare biomarcatori metabolici urinari legati all'effetto sistemico stesso dei farmaci anti-HCV (effetti collaterali). Nella fase del trattamento inoltre è stato possibile identificare gli intermedi pro-attivi e inattivi della ribavirina e del sofosbuvir nella sua forma inattiva GS 331007 (uridina fluorurata).

## **QUANTIFICAZIONE DELLA TRIMETILAMINA (TMA) E TRIMETILAMINOSSIDO (TMAO) NEI FLUIDI BIOLOGICI: EFFETTI SPECIFICI DELLA DIETA**

I. Anchesi, A. Salvo, A. Rotondo

Dipartimento di Scienze Biomediche, Odontoiatriche e delle Immagini Morfologiche e Funzionali  
(BIOMORF) Università degli Studi di Messina, Sez. SASTAS Polo Annunziata, Cittadella Universitaria  
Viale Annunziata, 98158 Messina

E-mail: [ivan.anches@hotmail.com](mailto:ivan.anches@hotmail.com)

L'analisi NMR dei fluidi biologici è un campo molto promettente grazie ai noti vantaggi di questa tecnica.[1] La gran quantità di dati ottenuti in tempi rapidi, consente il trattamento seriale di molti campioni per uno screening solitamente basato su valutazioni multiple di vari metaboliti,[2] il cui successo è testimoniato da ben documentate analisi statistiche multivariate.[3] In questo studio il nostro gruppo, partendo da campioni di fluidi biologici provenienti da soggetti affetti (e non) da specifiche patologie, si è focalizzato sull'analisi quantitativa di due soli metaboliti TMA e TMAO; ci siamo orientati principalmente sull'analisi delle urine per la facilità di reperimento e la migliore risoluzione spettrale dei campioni con minori sovrapposizioni per i segnali dei suddetti metaboliti.

La quantificazione accurata e precisa via NMR di TMA e TMAO (LOD < 0.2 mM) è valutata tramite l'aggiunta dello standard interno e integrazione dei relativi segnali (Fig.1a); è stato inoltre possibile rilevare l'innalzamento dei valori di TMAO in campioni di urine raccolti da soggetti dopo una specifica dieta (Fig 1b, es. a base di più di 200g di pesce). Poiché l'alta concentrazione di TMA nell'organismo è correlata con la presenza di determinate malattie genetiche, mentre l'elevata concentrazione di TMAO può essere causa di malattie di natura cardiovascolare, l'NMR potrà diventare importante ai fini diagnostici e preventivi nei confronti di patologie legate ai suddetti metaboliti. L'analisi NMR diretta delle urine umane risulta importante per rilevare gli effetti di specifiche diete[4] ai fini di: a) valutare predisposizioni o esposizioni nei confronti di possibili condizioni patologiche, b) suggerire diete che limitino l'esposizione o gli effetti delle stesse patologie.

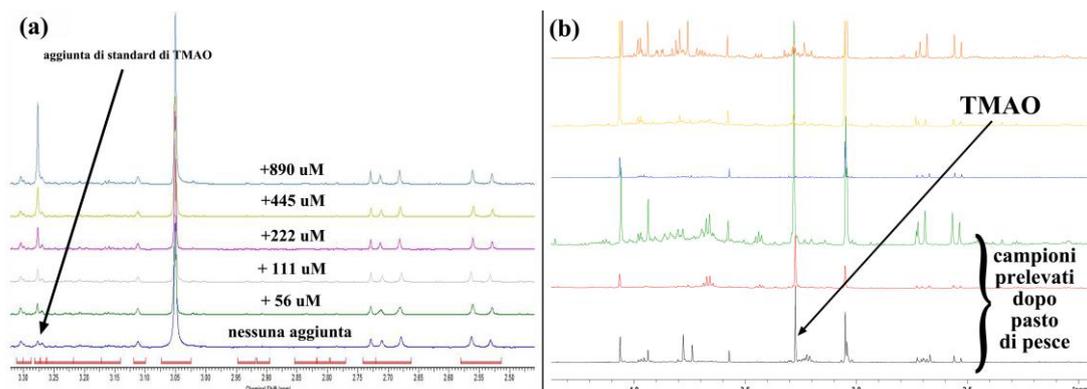


Fig. 1. Porzioni di spettri sovrapposti  $^1\text{H-NMR}$  (500 MHz): a) di campioni di urina con aggiunte progressive di TMAO; b) di campioni di urine diverse prelevate da tre soggetti dopo pasti a base di pesce (prime tre tracce) e campioni prelevati dagli stessi soggetti a distanza di almeno 24 ore da pasti a base di pesce.

## Referenze

- [1] A. C. Dona, B. Jiménez, H. Schäfer, E. Humpfer, M. Spraul, M. R. Lewis, J. T. M. Pearce, E. Holmes, J. C. Lindon, and J. K. Nicholson *Anal. Chem.* **86**, 9887–9894 (2014).
- [2] O. Beckonert, H. C. Keun, T. M. D. Ebbels, J. Bundy, E. Holmes, J. C. Lindon, and J. K. Nicholson, *Nature Protocols* **2**, 2692-2703 (2007).
- [3] A. Vignoli, D. M. Rodio, A. Bellizzi, A. P. Sobolev, E. Anzivino, M. Mischitelli, L. Tenori, F. Marini, R. Priori, R. Scrivo, G. Valesini, A. Francia, M. Morreale, M.R. Ciardi, M. Iannetta, C. Campanella, D. Capitani, C. Luchinat, V. Pietropaolo, and L. Mannina *Anal. Bioanal. Chem.*
- [4] J.I. Serrano-Contreras, I. García-Pérez, M. E. Meléndez-Camargo, and L. G. Zepeda *J. Proteome Res.*, **15**, 3241–3254 (2016).

# NOVITÀ SUI METODI <sup>1</sup>H-NMR PER CONTROLLI DI QUALITÀ E AUTENTICITÀ DEGLI ALIMENTI

C. Napoli

Bruker Italia S.r.l., Viale Lancetti 43, 20158 Milano, Italia

E-mail: claudia.napoli@bruker.com

Il mercato alimentare continua a crescere in dimensioni e complessità e, allo stesso modo, crescono anche le frodi sui relativi prodotti, guidate dalla prospettiva di elevati guadagni economici. I prodotti alimentari più costosi, ma anche quelli con elevati volumi di vendita, si sono rivelati i più vulnerabili alle sofisticazioni.

L'emergere di tecniche di analisi sempre più sofisticate, ha drasticamente ridotto le falsificazioni più evidenti, ma è inevitabilmente un fattore scatenante per la ricerca di metodi di contraffazione sempre più raffinati. La chiave per valutare la qualità dei cibi e aumentare il tasso di individuazione delle contraffazioni "intelligenti", è una tecnica analitica rapida ed efficiente che sia in grado di profilare sia matrici complesse, sia composti singoli.

Grazie alle sue esclusive capacità, la spettroscopia <sup>1</sup>H-NMR ad alta risoluzione, combinata con la chemiometria statistica multivariata, è la metodologia di screening scelta per il controllo della qualità e dell'autenticità del cibo [1,2].

Poiché l'analisi NMR è intrinsecamente quantitativa, è necessario un solo riferimento di quantificazione per tutte le componenti rilevabili in una miscela. Poiché permette di ottenere sia la quantificazione mirata di composti selezionati, sia impronte digitali non targeted in un'unica analisi, la risonanza magnetica nucleare è, allo stesso modo, un metodo specifico e olistico. La sua elevata riproducibilità consente il confronto di spettri da differenti laboratori in tutto il mondo e la creazione di database collettivi. È possibile una rielaborazione dei dati illimitata mediante applicazione di algoritmi statistici sempre aggiornati, la ri-modellazione di più o diversi parametri o la quantificazione retrospettiva di componenti di miscele non di interesse in un primo momento.

I nostri metodi di profiling alimentare, completamente automatizzati e certificati ISO-17025, coprono attualmente i succhi di frutta [3], il vino [4,5] e lo screening del miele, e sono in fase di sviluppo ulteriori metodologie.

Verranno qui presentate le applicazioni più recenti.

## Referenze

- [1] M. Spraul, B. Schuetz, E. Humpfer, M. Moertter, H. Schaefer, S. Koswig and P. Rinke *Magn. Reson. Chem.* **47**, 130-137 (2009).
- [2] D. W. Lachenmeier, E. Humpfer, F. Fang, B. Schütz, P. Dvorsak, C. Sproll, and M. Spraul *J. Agric. Food Chem.* **57**, 7194-7199 (2009).
- [3] M. Spraul, E. Humpfer, H. Schäfer, B. Schütz, M. Moertter, and P. Rinke: NMR-based mixture Analysis on the example of fruit juice quality control Using Statistics and Quantification In: "NMR Spectroscopy in Pharmaceutical Analysis", U. Holzgrabe, I. Wawer, B. Diehl, Elsevier 2008.
- [4] R. Godelmann, F. Fang, E. Humpfer, B. Schuetz, M. Bansbach, H. Schaefer, and M. Spraul *J. Agric. Food Chem.* **61**, 5610-5619 (2013).
- [5] R. Godelmann, C. Kost, C. D. Patz, R. Ristow, and H. Wachter *J. AOAC Int.* **99**, 1295-1304 (2016).



## **GLI AMICI DI ANNA LAURA**

## **LA RISONANZA MAGNETICA E GLI ALIMENTI: L'EREDITA' DI ANNA LAURA SEGRE**

A. P. Sobolev,<sup>‡</sup> D. Capitani,<sup>‡</sup> L. Mannina,<sup>†, ‡</sup> N. Proietti,<sup>‡</sup> V. Di Tullio<sup>‡</sup>

<sup>‡</sup>Istituto di Metodologie Chimiche, Laboratorio di Risonanza Magnetica "Annalaura Segre", CNR,  
I-00015 Monterotondo, Rome, Italy

<sup>†</sup>Dipartimento di Chimica e Tecnologie del Farmaco, Sapienza Università di Roma,  
Piazzale Aldo Moro 5, I-00185  
Rome, Italy

E-mail: [anatoly.sobolev@cnr.it](mailto:anatoly.sobolev@cnr.it)

Grazie alla risonanza magnetica la scienza degli alimenti oggi giorno possiede diversi strumenti di indagini utili e alle volte indispensabili per la caratterizzazione strutturale, morfologica e molecolare di qualsiasi alimento. Nell'era della metabolomica, iniziata con il XXI secolo, la risonanza magnetica gioca un ruolo ancora più importante essendo uno dei pochi metodi perfettamente adatti alle esigenze della metabolomica. Annalaura Segre è stata tra i primi a intuire e dimostrare le potenzialità della risonanza magnetica per lo studio degli alimenti. I suoi lavori sullo studio dell'olio di oliva tramite NMR hanno avuto un notevole impatto gettando le basi per una caratterizzazione molecolare più completa che permette di rispondere alle esigenze del settore olivicolo, di monitorare la qualità e la tracciabilità dell'olio. I lavori su altri alimenti hanno introdotto ed esplorato il nascente approccio metabolomico per scoprire i nuovi orizzonti della scienza degli alimenti. Annalaura è stata tra i primi ad applicare una nuova metodologia NMR basata su strumenti completamente non invasivi e portatili per lo studio di alimenti.

## LA RISONANZA MAGNETICA NELL'ARTE: UN'INTUIZIONE DI ANNA LAURA SEGRE

N.Proietti, V. Di Tullio, D. Capitani

Istituto di Metodologie Chimiche, Area della Ricerca di Roma 1, CNR  
Via Salaria Km 29,300 Monterotondo (Rm)

E-mail: noemi.proietti@cnr.it

L'applicazione della Risonanza Magnetica per lo studio delle opere del patrimonio Culturale è ormai consolidata da più di un ventennio. Anna Laura Segre fu un'antesignana nell'applicazione dell'NMR nell'arte. I suoi studi iniziarono nella metà degli anni '90 con la finalità di studiare e approfondire i processi di degrado della carta antica. Durante i suoi studi si rese subito conto che uno degli svantaggi dell'applicazione dell'NMR ai beni culturali era il campionamento. La grande intuizione di Anna Laura fu quella di promuovere lo sviluppo di un NMR portatile che potesse aggirare il problema del campionamento e consentire l'esecuzione delle misure direttamente nei musei e nei siti archeologici. La sua collaborazione con il Prof. Blümich e la Bruker all'interno del progetto Eureka Mouse consentì lo sviluppo e la commercializzazione di questo strumento. Dal 2000 ad oggi molti studi di opere d'arte (dipinti, affreschi, opere lignee, manufatti lapidei, opere contemporanee) sono stati possibili grazie a questa tecnica. Questa presentazione vuole essere un modo per ricordare il suo apporto scientifico in questo settore, ma anche mostrare come la sua eredità ci ha consentito di proseguire gli studi in questo ambito con lo stesso suo entusiasmo e raggiungendo anche qualche soddisfazione.

### Referenze

- [1] B. Blümich, J. Perlo, and F. Casanova *Progr. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc.* **52**, 197-269 (2008).
- [2] D. Capitani, V. Di Tullio, and N. Proietti *Progr. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc.* **64**, 29-69, (2012).

# AMYLOIDOGENESIS: LESSONS FROM SOLUTION AND SOLID STATE NMR

C. Luchinat

CERM and Department of Chemistry – University of Florence  
Via Luigi Sacconi 6, 50019 Sesto Fiorentino

E-mail: [luchinat@cerm.unifi.it](mailto:luchinat@cerm.unifi.it)

Amyloidogenesis is a pathological process of rearrangement of fibrillation-prone biological polypeptides which involves a progressive transition from soluble monomers to insoluble fibrils. The process is still largely not understood. NMR can contribute precious information along all phases of the transition, from the depletion of monomers from the solution [1], to the formation of soluble oligomers [2], to the progressive transformation of these oligomers into mature fibrils [3], whose structure depends on the composition of the oligomeric mixture [4]. I will try to give a 10 min survey of our contributions to understanding these processes.

## References

- [1] G. Bellomo, S. Bologna, L. Gonnelli, E. Ravera, M. Fragai, M. Lelli, and C. Luchinat, *Chem. Commun.*, *in press*
- [2] I. Bertini, G. Gallo, M. Korsak, C. Luchinat, J. Mao, and E. Ravera, *ChemBioChem* **14** (14), 1891-1897 (2013).
- [3] I. Bertini, L. Gonnelli, C. Luchinat, J. Mao, and A. Nesi, *J. Am. Chem. Soc.* **133** (40), 16013-16022 (2011).
- [4] Unpublished results from our laboratory

## **USING DYNAMIC NUCLEAR POLARIZATION TO ENHANCE THE SOLID-STATE NMR INVESTIGATION OF ORGANIC MATERIALS**

S. Viel

Aix Marseille Univ, CNRS, ICR, Marseille, France.

E-mail: s.viel@univ-amu.fr

Solid-state nuclear magnetic resonance (SSNMR) is a versatile technique that can provide high-resolution molecular structural information on a large variety of materials, either directly by acquiring the NMR experiments at high magnetic fields or indirectly by taking advantage of multidimensional correlation schemes (or both). Contrary to scattering techniques, SSNMR is perfectly suited for the analysis of powdered samples because it can access supramolecular structural information without the need of long-range translational order. The Achilles' heel of NMR, however, remains its low sensitivity. One of the most promising methods for boosting the SSNMR sensitivity is dynamic nuclear polarisation (DNP), which enhances nuclear magnetisation through the microwave-driven transfer (usually at cryogenic temperatures) of electron spin polarisation to nuclei via exogenous paramagnetic centres. DNP is nowadays attracting renewed attention owing to recent spectacular technological and theoretical developments. This communication will describe some of our most recent work in the field of DNP SSNMR for the characterisation of organic materials in the solid-state by focusing on organic polymers or pharmaceutical compounds.

## **EMMA AND MARCO FOR AND BEYOND NMR**

F. Ziarelli

Aix Marseille Univ, CNRS, Centrale Marseille, FSCM FR1739, Marseille, France.

E-mail: [fabio.ziarelli@univ-amu.fr](mailto:fabio.ziarelli@univ-amu.fr)

Nowadays, solid-state NMR (SSNMR) is often used as a routine technique for the analysis of a wide range of samples, particularly in the agro-food, pharmaceutical and biological fields. These fields often require statistical analysis of the results, which implies analyzing a large number of samples and hence recording a large number of experiments. In this respect, I will present two schemes that we have introduced to increase the number of analyzed samples per unit of time, including the Electronic Mixing-Mediated Annihilation (EMMA) method, which enables automatic elimination of background signals in SSNMR spectra without post-processing, and the Manual and Automatic Robotic Changer Operator (MARCO) scheme, which is a homemade 3D-printed sample changer used for high throughput SSNMR analysis.

## **ANNA LAURA, UNA DONNA RISONANTE CHE HA UNITO MONDI DIVERSI**

A. Ritieni

Dipartimento di Farmacia, Università di Napoli Federico II, Via Domenico Montesano 49,  
Napoli 80141, Italia.

E-mail: [alberto.ritieni@unina.it](mailto:alberto.ritieni@unina.it)

Leggendo quello che i suoi Allievi hanno scritto di lei, mi ha colpito la frase "...che si lavora tanto per quei pochi minuti di divertimento e di vera soddisfazione" che riassume il pensiero di chi ha mille difficoltà per trovare risorse, di chi ha aggiunto il lavoro di amministrativo, di ricercatore di fondi e di fare scouting per i giovani, di chi ha davanti mille difficoltà burocratiche e poche soluzioni, ma che riesce a dimenticare tutto, quando vede un lavoro pubblicato, una propria idea applicata o anche solo vede gli occhi, di chi sta imparando, che ti ringraziano.

Inizia la mia carriera accademica con tante telefonate che venivano da Roma spesso focalizzate, sempre in modo cortese e deciso, sulla pulizia dei campioni da analizzare per NMR, sulle impurezze che talvolta erano più concentrate della molecola da caratterizzare, sulla scelta del protocollo di estrazione e purificazione e su quel maledetto silicone che sembrava avvolgere tutto il nostro laboratorio.

Ho imparato il rigore nel fare le varie cose, ho imparato che occorre valorizzare il tempo prima di fare qualcosa e non di spenderlo poi cercare di recuperare gli errori fatti.

Persone come Anna Laura Segre, come Alessandro Ballio o come Giacomino Randazzo mi hanno arricchito ognuno per una parte e di ognuno ho preso il possibile che potessi prendere e che era alla mia portata.

Ho apprezzato sempre la tenacia di Anna Laura, così da non darmi mai vinto e ho imparato a ricominciare da zero, se necessario ed è servito più volte.

Ho sempre avuto come linea guida per il lavoro la trasversalità, l'integrazione e la sinergia delle proprie conoscenze e delle competenze per raggiungere un obiettivo comune e mai la gelosia è stata compagna del percorso.

Con chi di Anna Laura ha preso il testimone scientificamente, e col medesimo rigore, sono felice di avere oggi molti punti in comune e una visione sovrapposta, segno che chi ha seminato come Anna Laura, Giacomino e il prof. Ballio ha lavorato più che bene.

## SISTEMI OPTOELETTRONICI PER LA *DETECTION* DI MICOTOSSINE NEGLI ALIMENTI

M. Reverberi,<sup>‡</sup> G. De Cesare,<sup>†</sup> D. Caputo,<sup>†</sup> C. Manetti,<sup>‡</sup> F. Costantini,<sup>§</sup> C. Fanelli<sup>‡</sup>

<sup>‡</sup> Dipartimento Biologia Ambientale, Sapienza Università di Roma, P.le Aldo Moro 5,  
00185 Roma.

<sup>†</sup> Dipartimento DIET, Sapienza Università di Roma, Ingegneria dell'informazione elettronica e  
telecomunicazioni. Via Eudossiana, 18, 00184 Roma.

<sup>§</sup> Dipartimento di Chimica, Sapienza Università di Roma, P.le Aldo Moro 5, 00185 Roma

E-mail: massimo.reverberi@uniroma1.it

Le micotossine sono metaboliti secondari prodotti da funghi filamentosi che presentano una loro pericolosità per la salute umana ed animale [1]. Questa tossicità ha stimolato la comunità Europea a stabilire dei limiti per le micotossine negli alimenti e in generale nelle matrici alimentari [2]. L'agenzia internazionale per la ricerca sul cancro (IARC) ha inoltre classificato quasi tutte le micotossine in base alla loro potenziale cancerogenicità, conferendo un valore da 1 a 3 alla micotossina, laddove il valore 1 indica la sicura cancerogenicità in umano [3]. Tra le micotossine più pericolose da questo punto di vista, vi sono le aflatossine (IARC gruppo 1) e l'ocratossina A (IARC gruppo 2B). Infatti, queste sono le micotossine che presentano i limiti accettabili negli alimenti tra i più bassi (es. OTA nel vino, 2 ppb). In particolare, l'OTA in Europa rappresenta un problema serio per l'industria birricola e vinicola. Infatti i funghi che contaminano orzo (es. *Penicillium verrucosum*) e uva (es. *Aspergillus carbonarius*), sono stabilmente presenti in Europa (nord e sud rispettivamente).

I sistemi per ridurre il rischio di introdurre sul mercato alimenti contenenti valori di micotossine superiore alla norma si basano su sistemi rapidi di *detection*, quali ad esempio il saggio ELISA. Molto spesso però l'affidabilità di questi saggi è legata alla specificità degli anticorpi verso la tossina, cosa che, visto il basso peso molecolare di questi metaboliti (es. OTA mw 404), non è facilmente ottenibile. Una caratteristica chimico-fisica di alcune micotossine è di essere fluorescente. Ad esempio l'OTA se irraggiata con luce UV/blu a 360 nm emette un picco di fluorescenza a circa 465 nm. Da qui l'idea del nostro sistema optoelettronico per la *detection* in matrici alimentari liquide (vino e birra). L'idea è valsa il finanziamento di due progetti Europei; il progetto OTASENS ed il progetto DEMOTOX.

Lo strumento in questione consente il monitoraggio in *real time* di una corsa cromatografica (TLC) in cui sia stata caricata un quantitativo (max 5.5 mL) di matrice alimentare. La TLC si trova accoppiata ad una sorgente che emette UV a 360 nm ed un *detector* consistente in un insieme di fotosensori di silice amorfo. La fotocorrente generata dalla fluorescenza è proporzionale alla quantità di OTA nella matrice. I risultati indicano che il sistema è in grado di rilevare fino a 0.2 ng di OTA, quindi ben al di sotto dei limiti stabiliti dalla 1881/2006 [4]. Un miglioramento di questo strumento è stato ottenuto sostituendo la TLC con un chip microfluidico di vetro-PDMS con più canali funzionalizzati con aptameri, acidi nucleici aventi la proprietà di legarsi ad una molecola, specifici per l'OTA. La *detection* dell'OTA avviene grazie ad una reazione tra l'OTA, l'aptamero legato al microcanale e ad un altro aptamero (che lega un'altra parte dell'OTA) presente nella soluzione che "corre" nei canali

microfluidici. La formazione di questo “sandwich” produce un segnale chemiluminescente che viene letto dai fotosensori di silice amorfo. L’introduzione di questo sistema in alternativa alla TLC ha consentito di abbassare ulteriormente i limiti di *detection* dell’OTA nel vino a 0.82 mg/L portando la quantità di matrice necessaria per avere un’analisi “a norma” a 1 mL [5].

## Referenze

- [1] M. Reverberi, A. Ricelli, S. Zjalic, A. A. Fabbri, and C. Fanelli *Appl. Microbiol. Biotech.* **87**, 899-911, (2010).
- [2] COMMISSION REGULATION (EC) No 1881/2006. Official Journal of the European Union L 364/5, (2006).
- [3] IARC (1993) Some naturally occurring substances: food items and constituents, heterocyclic aromatic amines, and mycotoxins. IARC monographs on the evaluation of carcinogenic risk of chemicals to humans. International Agency for Research on Cancer, Lyon.
- [4] G. De Cesare, A. Nascetti, R. Scipinotti, C. Fanelli, A. Ricelli, and C. Caputo, *IEEE Trans. Comp., Pack., Manufactur. Technol. online* doi 10.1109/TCPMT.2018.2823868.
- [5] Costantini, F., Sberna, C., Petrucci, G., Reverberi, M., Domenici, F., Fanelli, C., Manetti, C., de Cesare, G., deRosa, M., Nascetti, A., Caputo, D. *Sens. Act. B* **230**, 31-39 (2016).

## **LE INTERAZIONI IDROFOBE NEL TRASFERIMENTO DI CHIRALITA' DA MOLECOLE A SISTEMI COMPLESSI**

G. Mancini

Istituto di Metodologie Chimiche, Area della Ricerca di Roma 1, CNR  
Via Salaria Km 29,300 Monterotondo (Rm)

E-mail: giovanna.mancini@cnr.it

La omogeneità chirale è una caratteristica pervasiva della Natura. L'assenza di simmetria chirale è infatti osservata in Natura a vari livelli di complessità, da particelle subatomiche, atomi e molecole al livello macroscopico di piante e animali. La domanda alla quale si cerca di dare risposta è se ci sia una correlazione tra la omogeneità chirale che si osserva a diversi livelli di complessità e, se così, come sia trasferita l'informazione stereochimica di chiralità.

E' noto che la chiralità di DNA e proteine è una conseguenza della omogeneità chirale dei loro costituenti monomerici, tuttavia il trasferimento di asimmetria dalle biomolecole a livelli di complessità maggiore non è ancora stato chiarito.

Usiamo aggregati polimolecolari di molecole anfifile, quali micelle e liposomi, come modelli per studiare il ruolo delle interazioni idrofobe nel trasferimento di chiralità da molecole a sistemi complessi.

## IL PERCORSO DEI POLIMERI

M. Delfini

Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Roma "La Sapienza", P.le Aldo Moro 5, 00185  
Roma

E-mail: maurizio.delfini@uniroma1.it

La Risonanza magnetica Nucleare, in particolare del C-13 ha fornito un contributo di straordinaria rilevanza nello studio dei polimeri sintetici fin dalla metà degli anni settanta, grazie all'utilizzazione di elevati campi magnetici che hanno migliorato in modo decisivo le problematiche inerenti la risoluzione e la sensibilità. E' stato così possibile affrontare e risolvere problematiche fino ad allora difficilmente risolubili univocamente come la valutazione della regolarità e della microstruttura di polimeri sintetici.

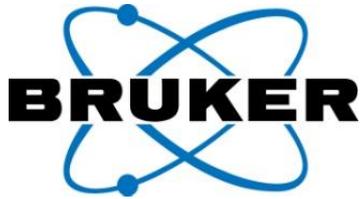
Polimeri di grande interesse scientifico ed industriale come omopolimeri del butadiene e dello stirene copolimeri butadiene–stirene, copolimeri etilene-vinilacetato, sintetizzati con differenti tipi di polimerizzazione sono stati studiati sulla base della loro microstruttura chiarendo non solo il tipo e il concatenamento delle unità ripetitive ma anche i relativi meccanismi di catalisi. Tali tipi di studi conservano ad oggi un grande interesse come dimostrato dalle pubblicazioni apparse nel 2018 su alcune delle più importanti riviste internazionali. Un ulteriore sviluppo nell'ambito dei meccanismi della catalisi, in particolare stereospecifica e stereoselettiva è stato dato dallo studio di poliolefine otticamente attive sia omopolimeri di eseni ed epteni sostituiti e dei loro copolimeri con stirene che hanno messo in evidenza meccanismi non ben chiari fino a quel momento nonché l'influenza delle catene laterali sulla catena in crescita. Nello stesso periodo sono stati studiati alcuni dei primi polimeri di sintesi per uso biomedico quali le poliamidoamine che oltre a mostrare interessanti caratteristiche chimico –fisiche erano in grado di legarsi con eparina dando origine a materiali non trombogenici. Anche tali polimeri conservano la loro attualità anch'essa attestata dalle pubblicazioni internazionali apparse nel 2018. Tale tipo di studio è proseguito con materiali polimerici da fonti rinnovabili che rappresentano con i loro copolimeri gli ultimi sviluppi nel settore dei polimeri biocompatibili.

Gli studi NMR sono stati condotti da Annalaura Segre e Maurizio Delfini in stretta collaborazione con il prof. Porri per il polibutadiene, i Professori Chiellini e Ciardelli per i vari tipi di poliolefine e con i gruppi dei Proff. Ferruti e Barbucci per le poliamidoamine.



## Sommario

COMUNICAZIONI.....	10
DIECI ANNI DOPO: UNA OVERVIEW SULLA RISONANZA MAGNETICA IN CAMPO ALIMENTARE .....	11
<sup>1</sup> H NMR DI EVOOs MONOCULTIVAR PROVENIENTI DA PUGLIA E TOSCANA: INFLUENZA DELLE CARATTERISTICHE PEDOClimATICHE .....	13
CARATTERIZZAZIONE VARIETALE DI DIVERSE CULTIVAR DI OLEA EUROPEA L. MEDIANTE TECNICHE MRI .....	15
PROTOCOLLO NMR E TRATTAMENTO DATI VERSO UNA RAPIDA E COMPLETA ETICHETTA NUTRIZIONALE PER OLII DI OLIVA .....	16
STUDIO DI FITONUTRIENTI E SOSTANZE BIOATTIVE PRESENTI NELLE FOGLIE DI OLIVI SECOLARI: UN APPROCCIO MULTIMETODOLOGICO .....	18
OLI NON FILTRATI, NON SOLO UN RITORNO ALLA NATURA, MA ANCHE NUTRIZIONE CON PIÙ BENESSERE. ....	19
RISONANZA MAGNETICA NUCLEARE PER DISCRIMINARE CAMPIONI DI PAPPÀ REALE IN FUNZIONE DELL'ORIGINE GEOGRAFICA, DEL PERIODO DI PRODUZIONE E DEL TIPO DI FIORITURE ACCESSIBILI ..	20
QUANTIFICAZIONE DI CARBOIDRATI IN MISCELE COMPLESSE. UNO STUDIO SUL MIELE .....	21
ENTOMONMR: APPROCCIO PRELIMINARE ALLO STUDIO NMR DI NUOVI ALIMENTI A BASE DI INSETTI .....	22
CARATTERIZZAZIONE DEL PROFILO METABOLICO DI DIVERSI COMPARTIMENTI DELLA SCIFOMEDUSA <i>RHIZOSTOMA PULMO</i> : RISULTATI PRELIMINARI.....	23
DINAMICA DEL PROFILO METABOLICO DEL LATTE MATERNO DI MAMME CON PARTO PRETERMINE: COLOSTRO, TRANSIZIONE E MATURO .....	24
EALIERB: LA PIATTAFORMA WEB .....	26
CARATTERIZZAZIONE E VALORIZZAZIONE DEGLI ALIMENTI CON EALIERB-OPENLAB: IL CASO DEL PEPERONE CORNETTO DI PONTECORVO DOP .....	27
CARATTERIZZAZIONE DI POMODORI DEL BASSO LAZIO ..... ATTRAVERSO UN APPROCCIO MULTIMETODOLOGICO .....	29
MONITORAGGIO IN TEMPO REALE DEL GRADO DI TOSTATURA DEL CAFFÈ MEDIANTE SPETTROSCOPIA NIR E ANALISI MULTIVARIATA DEI DATI.....	31
SVILUPPO DI RADICI DI CAROTA VIOLA E ARANCIONE VALUTATO MEDIANTE RISONANZA MAGNETICA NUCLEARE .....	33
DETERMINAZIONE SIMULTANEA DEI PRINCIPI ATTIVI DI <i>GLYCINE MAX</i> L. E <i>HUMULUS LUPULUS</i> L. IN INTEGRATORI ALIMENTARI .....	35
STUDIO <sup>1</sup> H NMR DEI PROFILI METABOLOMICI DI VINI TRATTATI CON METODO DEL RIPASSO CON VINACCE PER LA RIMOZIONE DI OTA .....	36
METABOLOMICA BASATA SU SPETTROSCOPIA NMR PER L'INDIVIDUAZIONE DI BIOMARCATORI URINARI DI EFFETTO E DI TRASFORMAZIONE METABOLICA DI FARMACI ANTI-HCV .....	38
QUANTIFICAZIONE DELLA TRIMETILAMINA (TMA) E TRIMETILAMINOSSIDO (TMAO) NEI FLUIDI BIOLOGICI: EFFETTI SPECIFICI DELLA DIETA .....	39
NOVITÀ SUI METODI <sup>1</sup> H-NMR PER CONTROLLI DI QUALITÀ E AUTENTICITÀ DEGLI ALIMENTI .....	41
GLI AMICI DI ANNA LAURA .....	43
LA RISONANZA MAGNETICA E GLI ALIMENTI: L'EREDITA' DI ANNA LAURA SEGRE .....	44
LA RISONANZA MAGNETICA NELL'ARTE: UN'INTUIZIONE DI ANNA LAURA SEGRE .....	45
AMYLOIDOGENESIS: LESSONS FROM SOLUTION AND SOLID STATE NMR.....	46
USING DYNAMIC NUCLEAR POLARIZATION TO ENHANCE THE SOLID-STATE NMR INVESTIGATION OF ORGANIC MATERIALS.....	47
EMMA AND MARCO FOR AND BEYOND NMR .....	48
ANNA LAURA, UNA DONNA RISONANTE CHE HA UNITO MONDI DIVERSI.....	49
SISTEMI OPTOELETTRONICI PER LA <i>DETECTION</i> DI MICOTOSSINE NEGLI ALIMENTI .....	50
LE INTERAZIONI IDROFOBE NEL TRASFERIMENTO DI CHIRALITÀ DA MOLECOLE A SISTEMI COMPLESSI .....	52
IL PERCORSO DEI POLIMERI.....	53



*C'è più gusto a stare bene.*