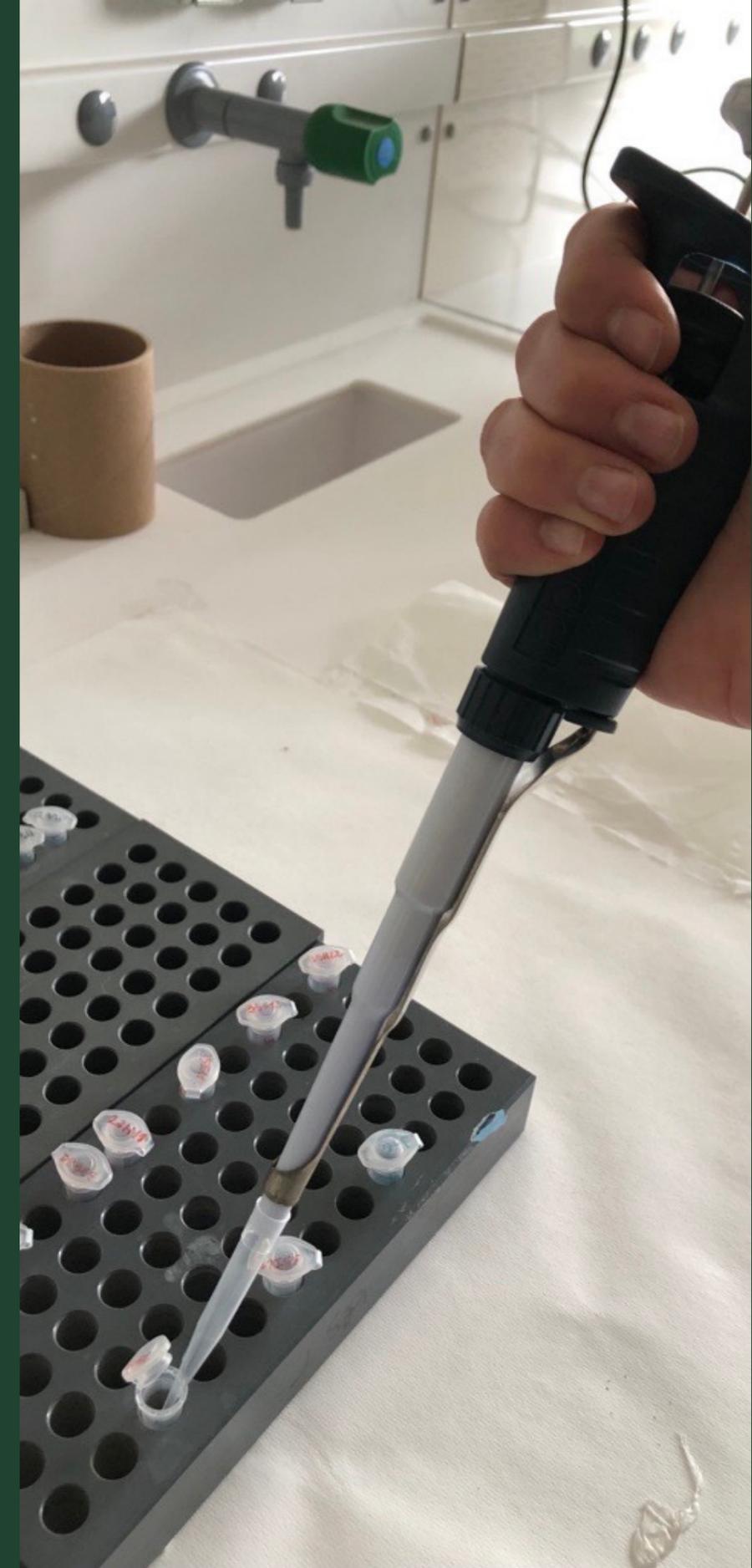


# Laboratorio di risonanza magnetica nucleare e spettrometria di massa

Università di Roma "Tor Vergata"

---

Dipartimento di Scienze e Tecnologie  
Chimiche



# Il laboratorio



## Risonanza Magnetica Nucleare (NMR)

è una tecnica analitica molto potente utilizzata per studiare diversi tipi di composti come piccole molecole (principi attivi farmaceutici o metaboliti), prodotti naturali, polimeri, biomolecole (proteine, acidi nucleici, carboidrati, lipidi) e altro. Infatti, misurando l'assorbimento della radiazione elettromagnetica in molecole immerse in un forte campo magnetico, è possibile ottenere informazioni dettagliate sia sulla struttura molecolare dei composti in esame sia sulla composizione di una miscela complessa. Le sue applicazioni riguardano la determinazione della struttura tridimensionale di un target farmacologico, la caratterizzazione di possibili farmaci e lo studio di meccanismi di interazione attraverso studi di dinamica *in vitro*, o eventualmente attraverso la risposta metabolica che la somministrazione di farmaci può produrre in un organismo animale e/o umano. È in quest'ultimo campo che la NMR vede la sua applicazione innovativa, è infatti possibile osservare e quantificare rigorosamente tutti i componenti più abbondanti presenti nei fluidi biologici come urina, sangue, saliva, estratti cellulari e tessuti, senza la necessità di lunghe ed elaborate preparazioni.



## **UHPLC- Accurate-Mass Q-TOF (UHPLC-HRMS)**

La cromatografia liquida ad alte prestazioni (HPLC) è un metodo di separazione molto potente, ampiamente utilizzato nelle scienze ambientali, nell'industria farmaceutica, nella ricerca biologica e chimica e in altri campi. In generale, può essere utilizzata per purificare, identificare e/o quantificare uno o più componenti di una miscela contemporaneamente.

La spettrometria di massa (MS) è una tecnica di rilevamento che misura il rapporto massa/carica delle specie ioniche. La procedura consiste in diverse fasi. In primo luogo, il campione viene iniettato nello strumento e poi evaporato. In seguito, le specie presenti nel campione vengono caricate con determinati metodi di ionizzazione. Infine, le specie ioniche vengono analizzate in base al loro rapporto massa/carica ( $m/z$ ) nell'analizzatore. L'identificazione mediante spettrometria di massa è ampiamente utilizzata insieme alla separazione cromatografica. Il nostro strumento utilizza la ionizzazione electrospray (ESI) per la generazione degli ioni e l'analizzatore Q-TOF che fornisce misure di massa accurate, accoppiato a un sistema UHPLC.

La LC ha un'efficiente capacità di separazione e la MS ha un'elevata sensibilità e una forte capacità di caratterizzazione strutturale. Inoltre, la TOF-MS ha diversi vantaggi rispetto ad altre tecniche di MS, tra cui velocità di acquisizione, elevata accuratezza nelle misurazioni di massa e un ampio intervallo di massa. La combinazione di LC e ESI-TOF-MS rappresenta un potente strumento per l'analisi quantitativa e qualitativa di molecole in matrici complesse, riducendo le interferenze della matrice.



# La ricerca



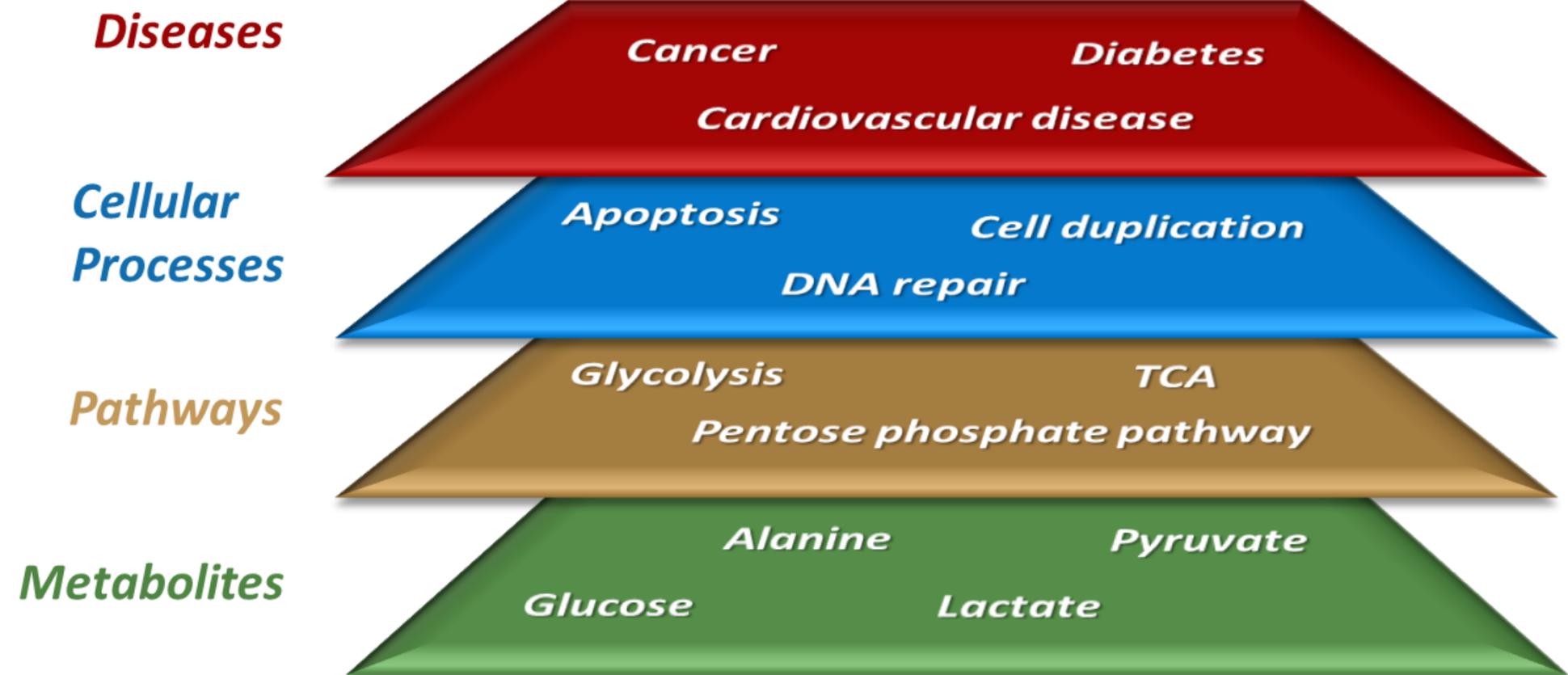
# Cosa possiamo fare

- Controllo strutturale, purezza e stabilità
- Analisi dello stato di aggregazione
- Determinazione della struttura tridimensionale delle macromolecole
- Studi di interazione proteina/ligando
- Studi di metabolomica

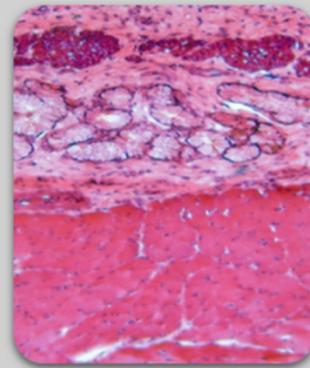
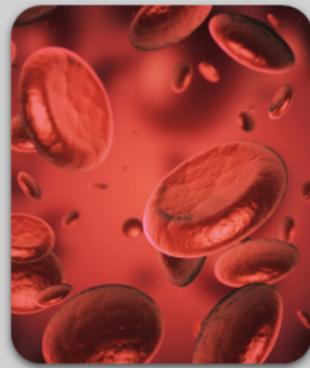


Tra le scienze omiche come la trascrittomica, la proteomica e la genomica, quella che si riferisce allo studio delle piccole molecole (MW <1500Da) è chiamata Metabolomica. La possibilità di osservare come le concentrazioni di metaboliti (lattato, glucosio, piruvato, aminoacidi, ...) variano in funzione di stimoli fisiopatologici, rappresenta un grande potenziale nella ricerca di biomarcatori di malattie e nella loro contestualizzazione all'interno di percorsi biochimici. Tuttavia, questo approccio scientifico non è limitato al contesto clinico, ma può essere esteso per tutte le sue potenzialità all'osservazione di qualsiasi indagine biofisica, dal settore agroalimentare a quello dei biomateriali.

# Metabolomica



# Tipi di campioni utilizzati nei nostri studi di metabolomica



**Biofluidi:**  
Plasma,  
Urine,  
Saliva,  
CSF,  
...

**Estratti di  
cellule,  
microrganismi  
o  
batteri**

**Terreni di  
coltura di  
cellule,  
microrganismi  
o  
batteri**

**Tessuti:**  
Muscoli,  
midollo  
osseo

**Estratti di  
piante**

**Cibo:**  
carne,  
formaggio,  
vegetali,  
olio, vino,  
birra,...

**Altre  
miscele  
complesse:**  
terreno,  
sedimenti  
marini,  
acqua di  
mare e  
fiume,...

# Alcune delle nostre pubblicazioni

Structure 14, 309–319, February 2006 ©2006 Elsevier Ltd All rights reserved DOI 10.1016/j.str.2005.11.012

## Molecular Basis for Phosphorylation-Dependent, PEST-Mediated Protein Turnover

Maria M. García-Alai,<sup>1,4</sup> Mariana Gallo,<sup>2,4</sup> Marcelo Salame,<sup>1</sup> Diana E. Wetzler,<sup>1</sup> Alison A. McBride,<sup>3</sup> Maurizio Paci,<sup>2</sup> Daniel O. Cicero,<sup>2</sup> and Gonzalo de Prat-Gay<sup>1,\*</sup>

*J. Am. Chem. Soc.* 1995, 117, 1027–1033 1027

NMR Analysis of Molecular Flexibility in Solution: A New Method for the Study of Complex Distributions of Rapidly Exchanging Conformations. Application to a 13-Residue Peptide with an 8-Residue Loop

D. O. Cicero, G. Barbato, and R. Bazzo\*

Contribution from the Istituto di Ricerche di Biologia Molecolare (IRBM) P. Angeletti, via Pontina km 30,600, (00040) Pomezia, Rome, Italy

Received June 3, 1994\*

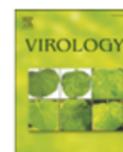
Virology 405 (2010) 424–438



Contents lists available at ScienceDirect

Virology

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/yviro](http://www.elsevier.com/locate/yviro)



Structural characterization of the Hepatitis C Virus NS3 protease from genotype 3a: The basis of the genotype 1b vs. 3a inhibitor potency shift

Mariana Gallo<sup>a,1</sup>, Matthew James Bottomley<sup>b,1</sup>, Matteo Pennestri<sup>a</sup>, Tommaso Eliseo<sup>a</sup>, Maurizio Paci<sup>a</sup>, Uwe Koch<sup>b</sup>, Renzo Bazzo<sup>a,b</sup>, Vincenzo Summa<sup>b</sup>, Andrea Carfi<sup>b</sup>, Daniel O. Cicero<sup>a,\*</sup>

molecules



Article

## Personalized Metabolic Profile by Synergic Use of NMR and HRMS

Greta Petrella<sup>1</sup>, Camilla Montesano<sup>2</sup>, Sara Lentini<sup>1</sup>, Giorgia Ciufolini<sup>1</sup>, Domitilla Vanni<sup>1</sup>, Roberto Speziale<sup>3</sup>, Andrea Salonia<sup>4,5</sup>, Francesco Montorsi<sup>4,5</sup>, Vincenzo Summa<sup>3</sup>, Riccardo Vago<sup>4,5</sup>, Laura Orsatti<sup>3</sup>, Edith Monteagudo<sup>3</sup> and Daniel Oscar Cicero<sup>1,\*</sup>

## PLOS NEGLECTED TROPICAL DISEASES

OPEN ACCESS PEER-REVIEWED

RESEARCH ARTICLE

## Drug effects on metabolic profiles of *Schistosoma mansoni* adult male parasites detected by <sup>1</sup>H-NMR spectroscopy

Alessandra Guidi, Greta Petrella, Valentina Fustaino, Fulvio Saccoccia, Sara Lentini, Roberto Gimmelli, Giulia Di Pietro, Alberto Bresciani, Daniel Oscar Cicero, Giovina Ruberti



metabolites



Article

## Metabolic Reprogramming of Castration-Resistant Prostate Cancer Cells as a Response to Chemotherapy

Greta Petrella<sup>1,\*</sup>, Francesca Corsi<sup>2,†</sup>, Giorgia Ciufolini<sup>1</sup>, Sveva Germini<sup>1</sup>, Francesco Capradossi<sup>2</sup>, Andrea Pelliccia<sup>1,2</sup>, Francesco Torino<sup>3</sup>, Lina Ghibelli<sup>2,†</sup> and Daniel Oscar Cicero<sup>1,†</sup>



International Journal of Molecular Sciences



Article

## The Interplay between Oxidative Phosphorylation and Glycolysis as a Potential Marker of Bladder Cancer Progression

Greta Petrella<sup>1</sup>, Giorgia Ciufolini<sup>1</sup>, Riccardo Vago<sup>2,3,\*</sup> and Daniel Oscar Cicero<sup>1,\*</sup>

# Reach out

## Direzione Scientifica

Prof. Daniel Oscar Cicero

## Assegnista di ricerca

Dr. Greta Petrella

## Assistenza Tecnica

Mr. Fabio Bertocchi

## Numero telefonico

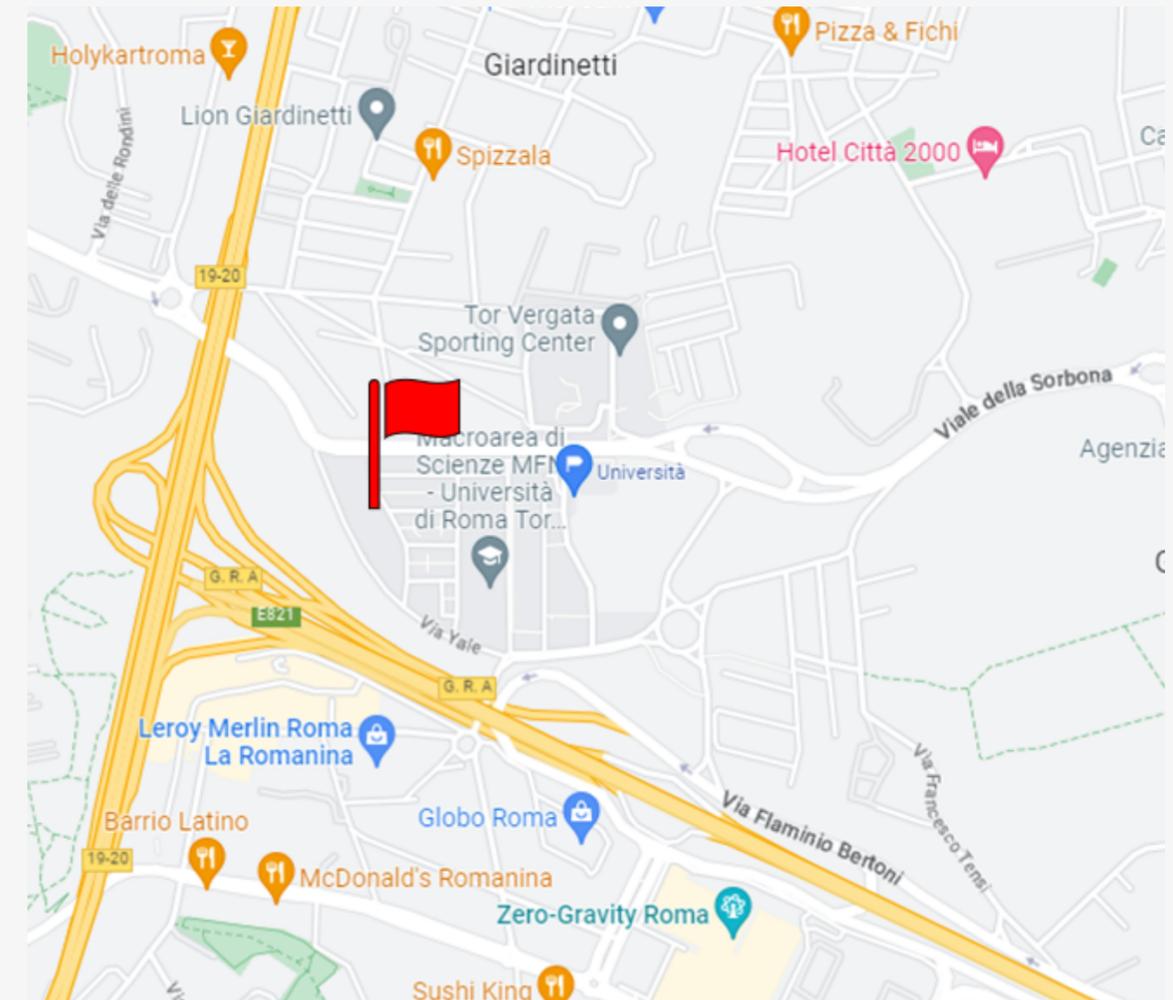
+390672594835

## e-mail

cicero@scienze.uniroma2.it

petrella@scienze.uniroma2.it

bertocc@uniroma2.it



Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche  
Università degli studi di Roma "Tor Vergata"  
Via della Ricerca Scientifica, 1 - 00133 Rome, Italy