

Sviluppo di metodi analitici innovativi basati sulle scienze omiche per la caratterizzazione di classi di composti strutturalmente correlati in matrici complesse

Andrea Cerrato^{1,*}, Anna Laura Capriotti¹

¹Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Roma La Sapienza, Roma, Italia

*andrea.cerrato@uniroma1.it

Abstract

Negli ultimi anni, lo sviluppo di strumentazioni di spettrometria di massa ad alta risoluzione (*high-resolution mass spectrometry*, HRMS) ha permesso di aprire le porte a numerose nuove applicazioni nel campo delle scienze omiche. La spettrometria di massa ad alta risoluzione ha infatti permesso lo sviluppo di approcci *untargeted*, nei quali non è necessaria la conoscenza pregressa dei composti da analizzare, portando alla scoperta di composti di interesse inaspettati o ancora non riportati. Nello sviluppo di strategie *untargeted* nel campo delle scienze omiche, ci sono diverse criticità da affrontare: ampi intervalli di range dinamico, performance del metodo non consistenti per classi di composti diverse, la necessità di software per il processamento dei dati grezzi e la necessità di servirsi di librerie spettrali per la validazione manuale dei composti[1]. In questo contesto, strategie dedicate a classi di composti strutturalmente correlate, con proprietà chimico-fisiche omogenee, permettono numerosi vantaggi e performance migliori. Il pretrattamento del campione è di importanza cruciale quando si trattano matrici complesse, con lo scopo di rimuovere eventuali interferenze e concentrare gli analiti presenti in tracce. L'acquisizione dei dati è il nucleo di ogni metodo analitico, e la HRMS offre un'ampia varietà di approcci differenti, quali l'infusione diretta, la *flow injection*, l'accoppiamento LC-MS, l'acquisizione in *full-scan*, in *data-dependent* e *data-independent*[2]. Infine, il processamento dei dati e l'identificazione dei composti sono divenuti aspetti critici non appena si sono diffusi gli approcci di spettrometria di massa *untargeted*. Gli ampi set di dati ottenuti dall'analisi mass-spettrometrica, infatti, non possono essere maneggiati senza l'utilizzo di specifici software che estraggono i rapporti *m/z*, raggruppano gli addotti, allineano i picchi, predicono le composizioni molecolari e rimuovono i composti presenti nei bianchi. I dati estratti, quindi, non sono solo dipendenti dalle condizioni sperimentali, ma anche dagli algoritmi ed i parametri dell'approccio di processamento dei dati scelto. Inoltre, le librerie spettrali disponibili online sono necessarie per associare le *features* estratte a composti esistenti. Nel caso in cui è necessaria una caratterizzazione ampia e dettagliata di classi di composti strutturalmente correlati, i *workflow* di processamento dati disponibili nei software e i database disponibili online non sono sufficienti. Nel corso del seminario, saranno discussi diversi approcci analitici che intervengono sia nello step di pretrattamento del campione, sia nell'acquisizione dei dati, sia nel processamento dei dati. In particolare, per evidenziali diversi aspetti cruciali, saranno riportati vari casi di studio: i peptidi a catena corta[3,4], i fitocannabinoidi[5], e i lipidi contenenti fosfolipina.

1. Rampler, E.; Abiead, Y. El; Schoeny, H.; Ruzs, M.; Hildebrand, F.; Fitz, V.; Koellensperger, G.. *Anal. Chem.* **2021**, *93*, 519–545, doi:10.1021/acs.analchem.0c04698.
2. Bonney, J.R.; Prentice, B.M.. *Anal. Chem.* **2021**, *93*, 6311–6322, doi:10.1021/acs.analchem.1c00061.
3. Piovesana, S.; Capriotti, A.L.; Cerrato, A.; Crescenzi, C.; La Barbera, G.; Laganà, A.; Montone, C.M.C.M.;

- Cavaliere, C.. *Anal. Chem.* **2019**, *91*, 11474–11481, doi:10.1021/acs.analchem.9b03034.
4. Cerrato, A.; Aita, S.E.; Capriotti, A.L.; Cavaliere, C.; Montone, C.M.; Laganà, A.; Piovesana, S. *Talanta* **2020**, *219*, 121262, doi:10.1016/j.talanta.2020.121262.
 5. Cerrato, A.; Citti, C.; Cannazza, G.; Capriotti, A.L.; Cavaliere, C.; Grassi, G.; Marini, F.; Montone, C.M.; Paris, R.; Piovesana, S.;. *Talanta* **2021**, *230*, 122313, doi:10.1016/j.talanta.2021.122313.