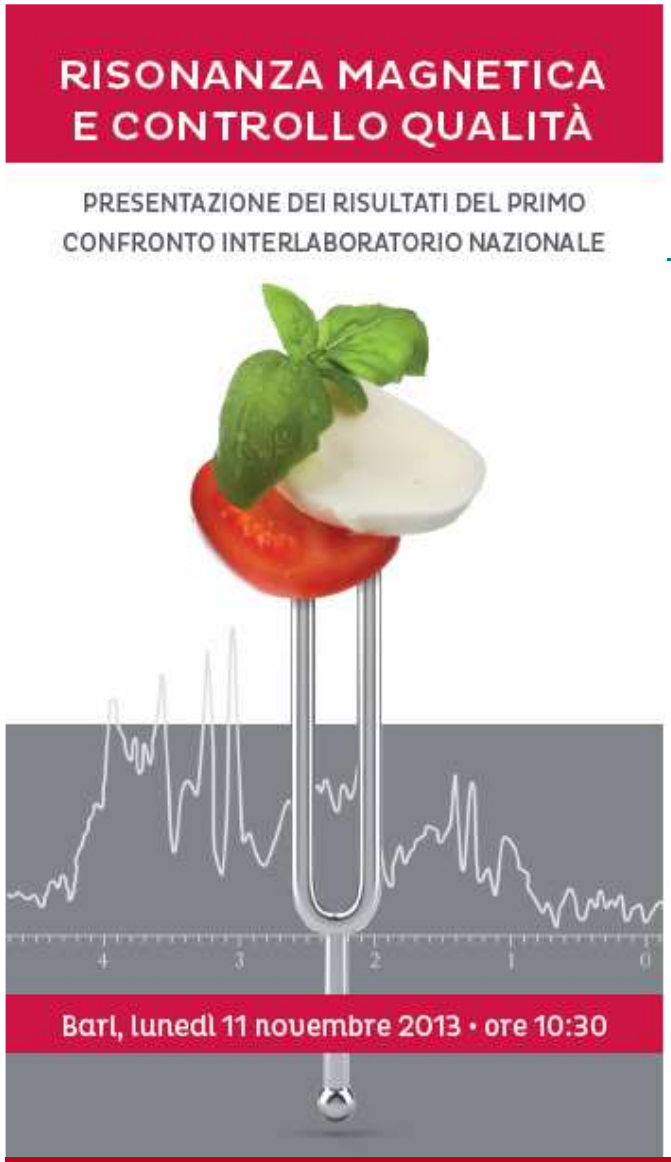


GIDRM

Gruppo Italiano Discussione Risonanze Magnetiche

GIDRM:
un gruppo di appassionati di NMR

Università degli Studi di Padova

Stefano Mammi
Dipartimento di Scienze Chimiche
stefano.mammi@unipd.it

Le Nostre Origini

Milano, 26 Aprile 1974

Caro Collega,

le adesioni al sondaggio per la formazione di un Gruppo Italiano di RMN sono finora oltre settanta. Per questo si é ritenuto opportuno fissare per il 16 Maggio 1974 un primo incontro per definire i dettagli organizzativi e la regolamentazione del Gruppo.

Abbiamo abbinato questa riunione con il seminario che il Dr. J. Feeney terrà presso l'Istituto di Chimica delle Macromolecole, tenendo in considerazione l'interesse scientifico generale che esso può avere per tutti i partecipanti.

La riunione del Gruppo si terrà nella stessa sede ICM, Via A. Corti n.12 - Milano, con inizio alle ore 10.

Il presente invito é esteso a tutti gli interessati anche se non interpellati direttamente.

Cordiali saluti.

G.Gatti F.Taddei

La Nostra *Mission*

STATUTO GIDRM

Art. 1. – È costituito il Gruppo Italiano di Discussione delle Risonanze Magnetiche (G.I.D.R.M.). Il G.I.D.R.M. è una libera Associazione di fatto, apartitica e apolitica, con durata illimitata nel tempo e senza scopo di lucro, regolata a norma del Titolo I Cap. III, art. 36 e segg. del codice civile, nonché del presente Statuto. La sede dell'associazione è fissata presso la sede lavorativa del Presidente del G.I.D.R.M.

Art. 2. – Il G.I.D.R.M. si propone di contribuire allo sviluppo, al coordinamento ed alla diffusione di attività didattiche e di ricerca riguardanti tutti i settori delle risonanze magnetiche.

GIDRM

Gruppo Italiano Discussione Risonanze Magnetiche

www.gidrm.org

La Nostra *Mission*

STATUTO GIDRM

Art. 3. Il G.I.D.R.M., per il raggiungimento dei suoi fini, intende promuovere varie attività; in particolare:
a) sostenere e favorire le interazioni tra i soci che operano nelle Università italiane e negli Enti di Ricerca pubblici e privati e la loro partecipazione ad eventi scientifici nazionali ed internazionali;
b) promuovere iniziative tendenti a sviluppare l'interesse di altri ricercatori verso il settore delle risonanze magnetiche;
c) stabilire rapporti di cooperazione con Società, Associazioni, ed Istituzioni scientifiche nazionali ed estere;
d) favorire la diffusione, anche attraverso canali telematici, di documentazioni e di informazioni scientifiche, didattiche e tecniche attinenti i vari settori delle risonanze magnetiche.

www.gidrm.org

Chi Siamo Oggi

250 soci, provenienti da: Università
Enti di Ricerca
Industria

Ci occupiamo di:

- Biomolecules
- Solid State – Materials
- Small Molecules
- Food Science
- Biomedicine
- Energy and Environment
- NMR Methodology
- Metabolomics
- MR Imaging
- Cultural Heritage
- …

GIDRM

Gruppo Italiano Discussione Risonanze Magnetiche

www.gidrm.org

Le Nostre Attività:

Il Congresso Annuale

Joint EUROMAR 2010
and 17th ISMAR Conference

www.gidrm.org

Le Nostre Attività:

www.gidrm.org

Le Nostre Attività:

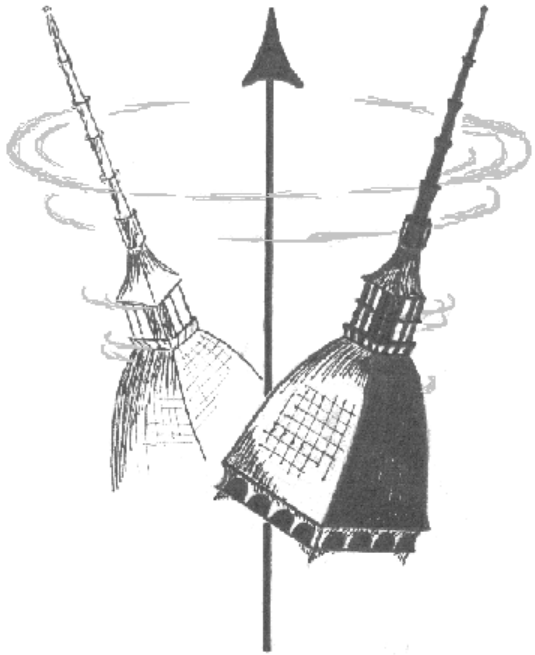
La Scuola

SCUOLA NAZIONALE
DI RISONANZA MAGNETICA NUCLEARE

- Corso Base
- Corso Avanzato
- Corso Specialistico

  2010: Struttura, dinamica
  e interazioni di proteine

  2007: NMR di piccole molecole
  di interesse
  organico-farmaceutico



Torino 23 - 27 Settembre 2013

www.gidrm.org

Le Nostre Attività:

Le Giornate Tematiche 2013

Investigating Soft Matter using NMR

30 settembre 2013, Università degli Studi di *Bari*

INSTRUCT Training Course:
In-cell NMR analysis of biomolecular structure and function

2-6 dicembre 2013, CERM, Sesto Fiorentino

GIDRM

Gruppo Italiano Discussione Risonanze Magnetiche

www.gidrm.org

Le Nostre Attività:

La Borsa di Studio Annalaura Segre

2010: **Francesca Martini**, Università di Pisa
Caterina Cafiero, CRA, Monterotondo (RM)

2011: **Chiara Di Meo**, IMC – CNR, Montelibretti
Chiara Facchin, Università di Padova

2012: **Alberto Ceccon**, Università di Verona
Edoardo Gaude, Fondazione Centro San Raffaele del Monte Tabor, Milano

2013: **Serena Zanzoni**, Università di Verona

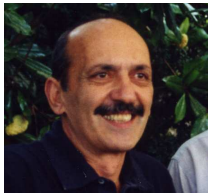
GIDRM

Gruppo Italiano Discussione Risonanze Magnetiche

www.gidrm.org

La Nostra Eredità:

Le Medaglie

1989 Pierandrea Temussi 

1990 Carlo Corvaja

1991 Ivano Bertini

1992 Rosanna Mondelli

1993 Dante Gatteschi

1994 Ludovico Lunazzi

1995 Annalaura Segre

1996 Silvio Aime

1997 Carlo Alberto Veracini

1999 Lucia Zetta

2001 Claudio Luchinat

2002 Franca Podo

2003 Alberto Spisni

2004 Lucia Banci

La Nostra Eredità:

Le Medaglie

2005 Henriette Molinari

2006 Claudio Dalvit

2007 Roberto Gobetto

2008 Renzo Bazzo

2009 Mauro Botta

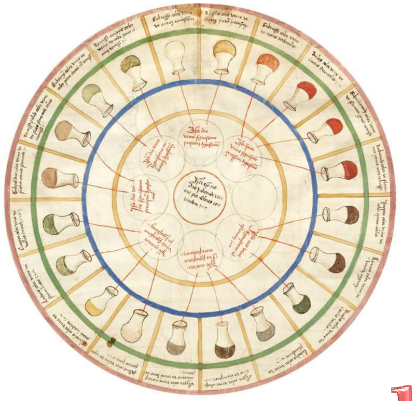
2011 Stan Sykora

2012 Maurizio Paci

2013 Rino Esposito

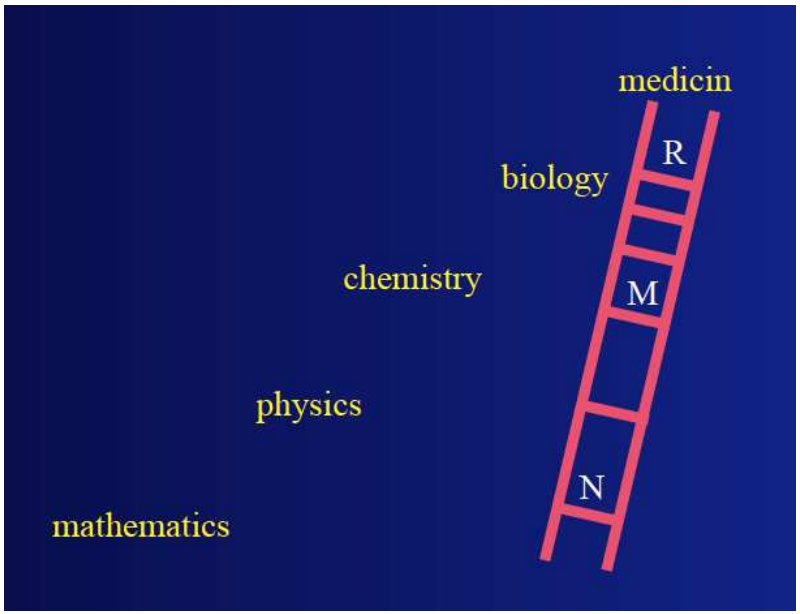
www.gidrm.org

Analisi quantitativa universale di



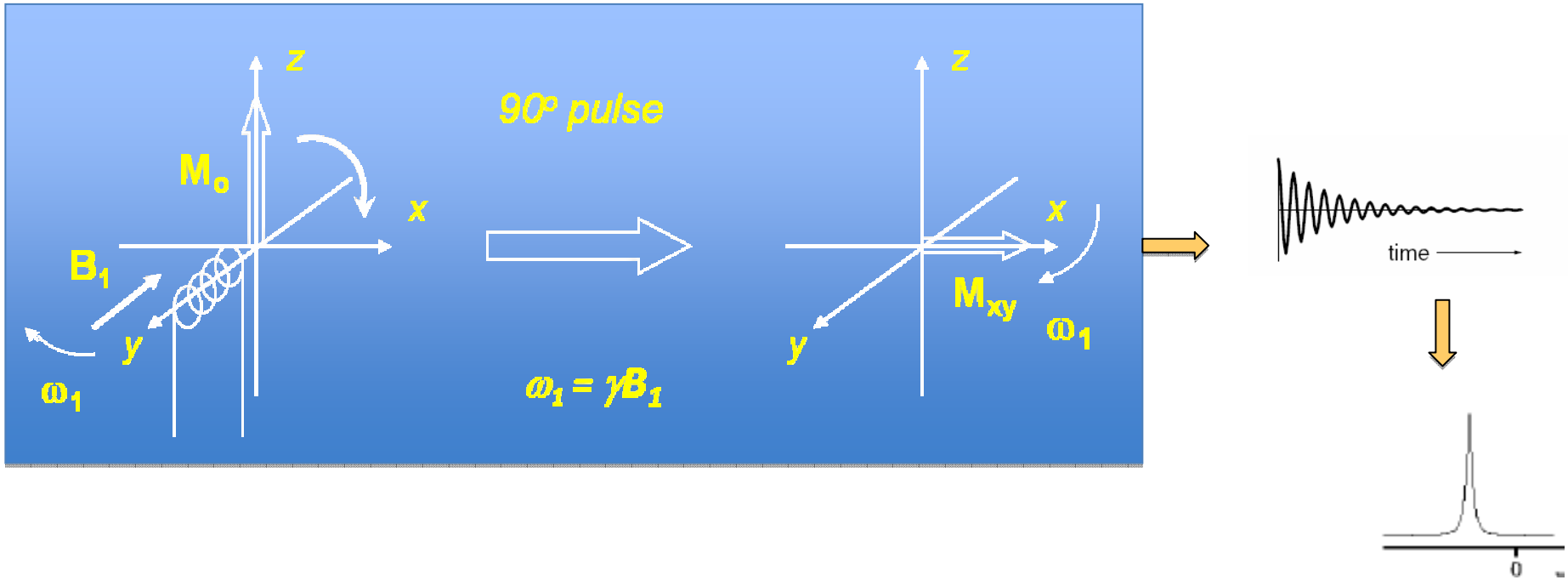
matrici complesse

mediante risonanza magnetica

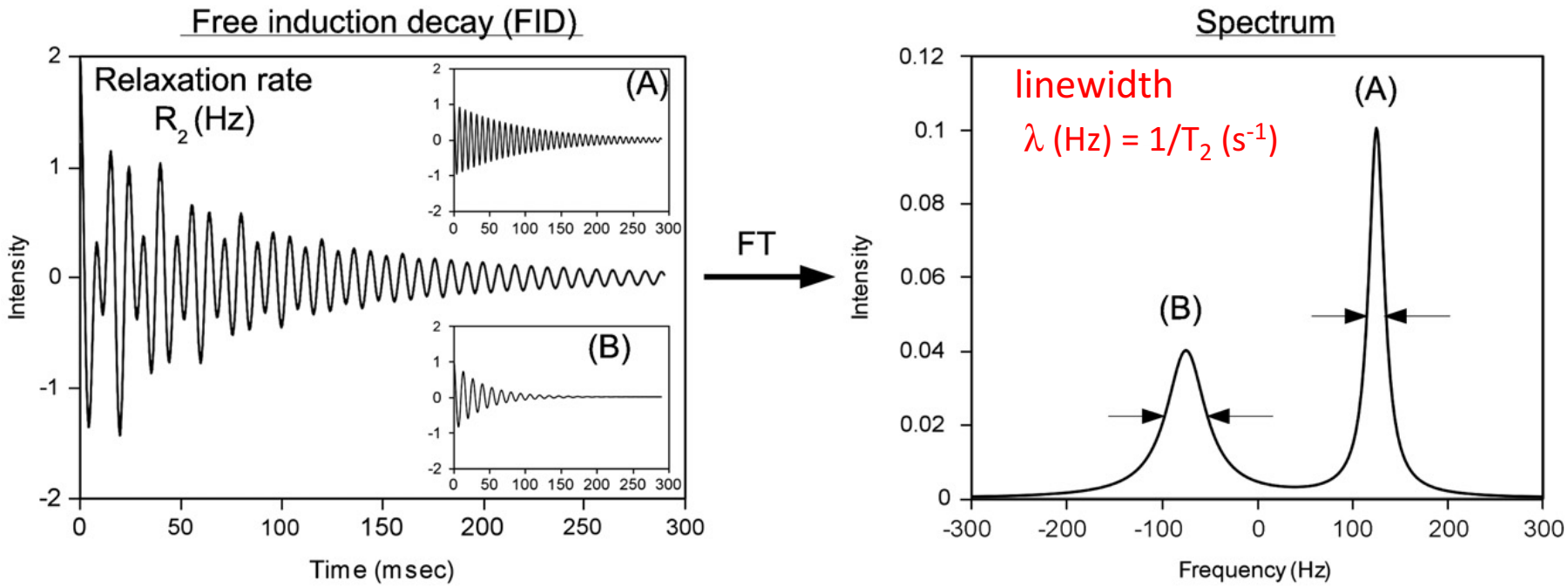


Lo spettrometro NMR è un dispositivo essenzialmente capace di:

- Magnetizzare gli spin nucleari tramite una forte campo magnetico
- Ruotare la polarizzazione di spin tramite impulsi di radiofrequenza per produrre una magnetizzazione trasversale
- Rivelare le piccole correnti elettriche oscillanti indotte dalla precessione della magnetizzazione trasversale

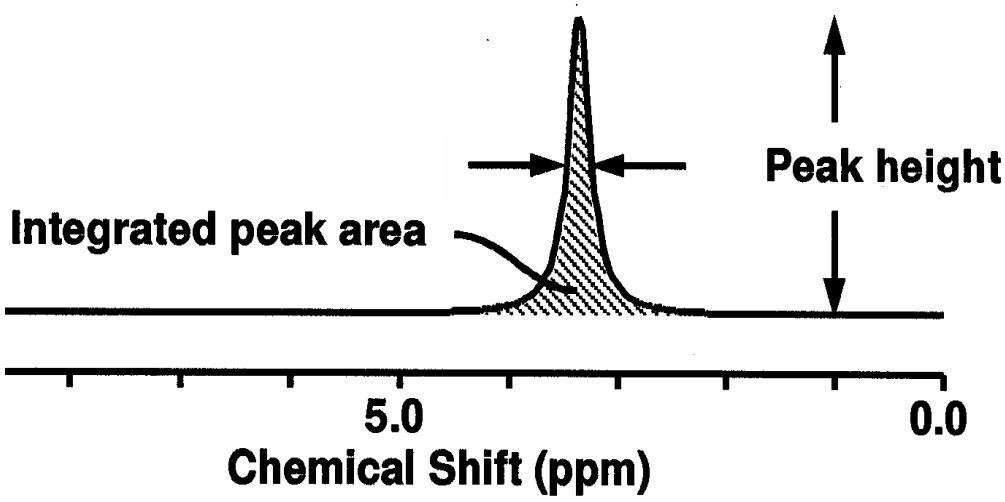


Le tre principali osservabili NMR (δ, I, λ)



- Chemical shift δ: positione del picco, informa sull'intorno chimico
- Intensità **I**: area/altezza del picco, informa sulle popolazioni
- Larghezza di riga λ è la larghezza del picco a mezza altezza, informa sulla dinamica locale

L'NMR fornisce informazioni qualitative e quantitative



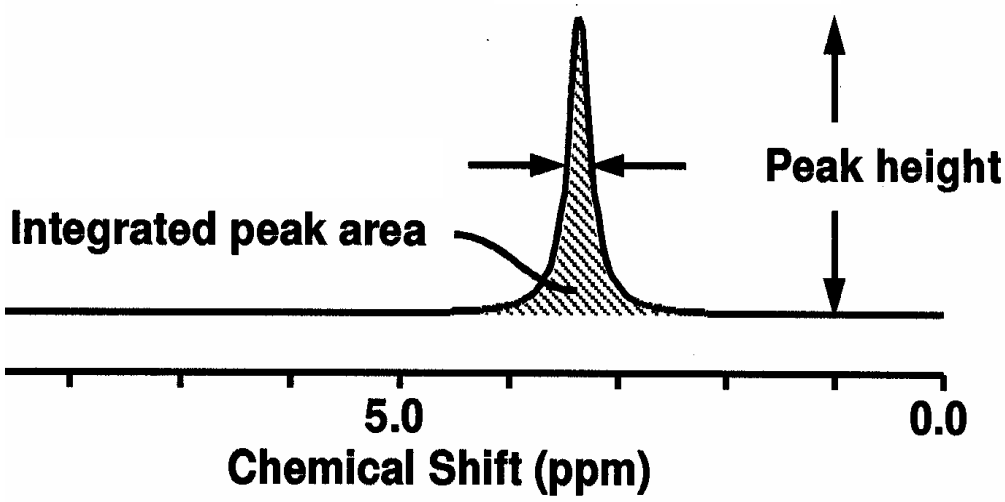
qNMR

L'intensità del segnale è direttamente proporzionale al numero dei nuclei che danno origine a quella specifica risonanza

Parametri di acquisizione da definire in qHNMR:

- Standard di riferimento (interno/esterno)
- Nucleo di osservazione (normalmente ^{1}H)
- Numero di scansioni (S/N > 250 per un'integrazione corretta)
- Tempo di acquisizione (3-5 volte T_2)
- Tempo di riciclo (5 volte T_1)
- Guadagno del ricevitore ottimale

L'NMR fornisce informazioni qualitative e quantitative

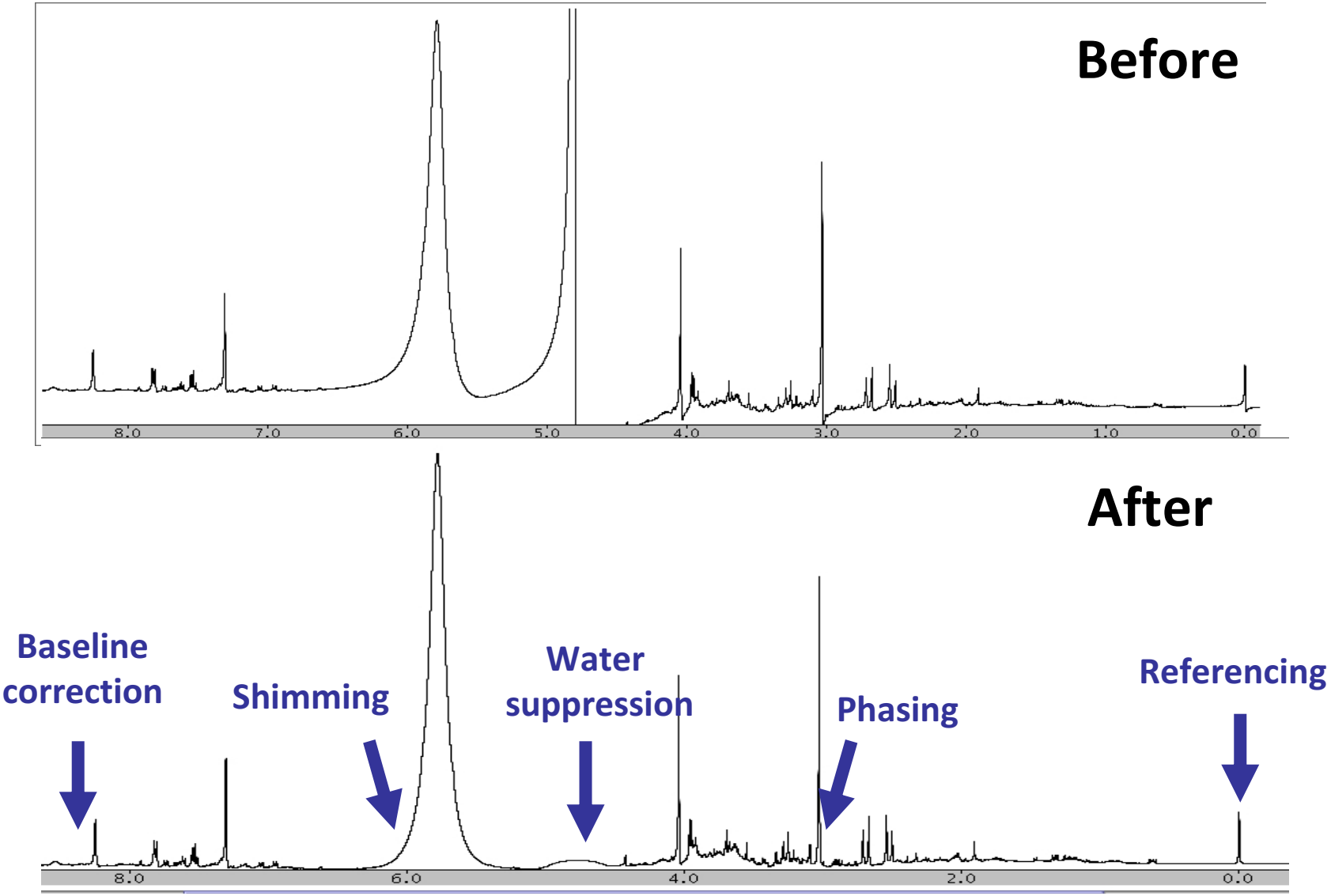


qNMR

L'intensità del segnale è direttamente proporzionale al numero dei nuclei che danno origine a quella specifica risonanza

Parametri di processamento da definire in qHNMR:

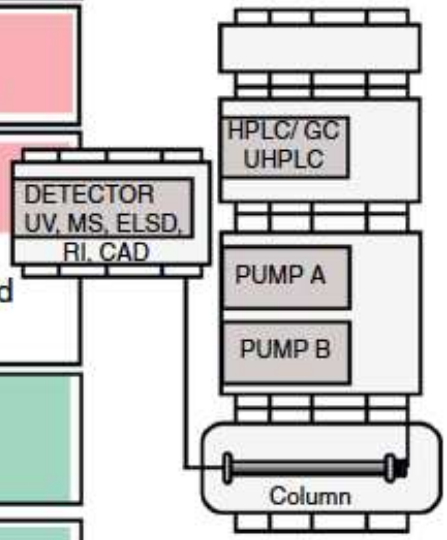
- Zero-filling
- Apodizzazione
- Correzione della fase
- Correzione della linea di base
- Definizione della regione di integrazione


Before
8.0
7.0
6.0
5.0
4.0
3.0
2.0
1.0
0.0
After
Baseline correction
Shimming
Water suppression
Phasing
Referencing
8.0
6.0
4.0
2.0
0.0

Perchè universale?

Vantaggi qNMR: facilità preparazione campione, veloci tempi di analisi, opzioni multiple di calibrazione senza ricorrere agli stessi materiali come riferimento

Quantitative nuclear magnetic resonance		Hyphenated-chromatography techniques
Weight/dilution Recovery after analysis	Sample preparation	Weight/dilutions/filtration No recovery after analysis
Structural properties § Universal detection	Detection	Physical properties * Physical restrictions
Certified reference material **Universal calibrant** Internal/external standard (with/without calibration curve) ERETIC, QUANTAS, ...	Calibrant Quantitation	Structurally identical reference Internal/external standard and calibration curve
Low µ*M* Optimization with cryoprobes and DNP	Sensitivity	Low nM-pM (MS) Low µ*M* (UV, ELSD)
Resonance overlapping Optimization with 2D NMR	Selectivity & Specificity	Chromatographic separation = Inherently better specificity
Instrument independent	Reproducibility	Mainly instrument-dependent



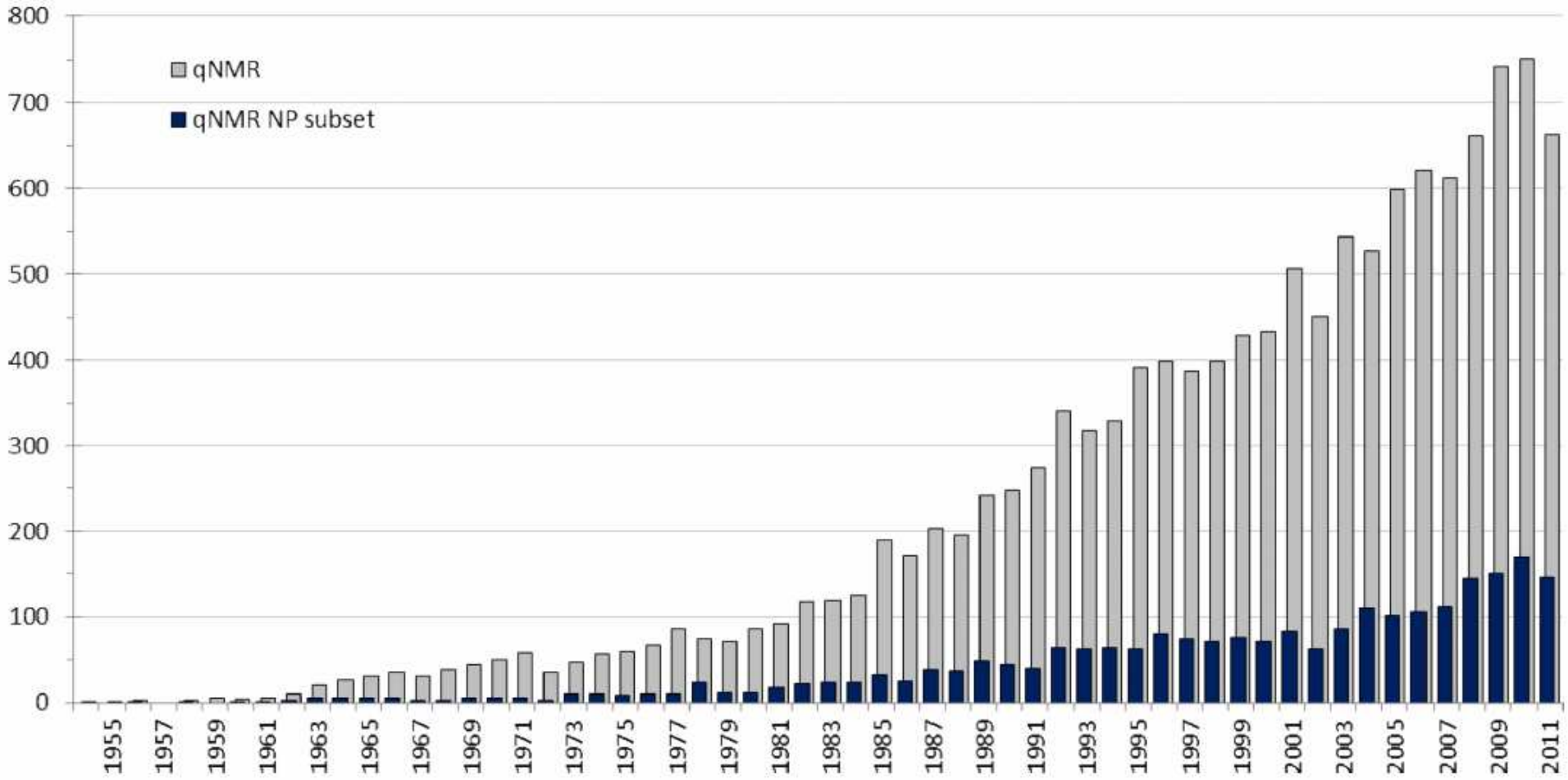
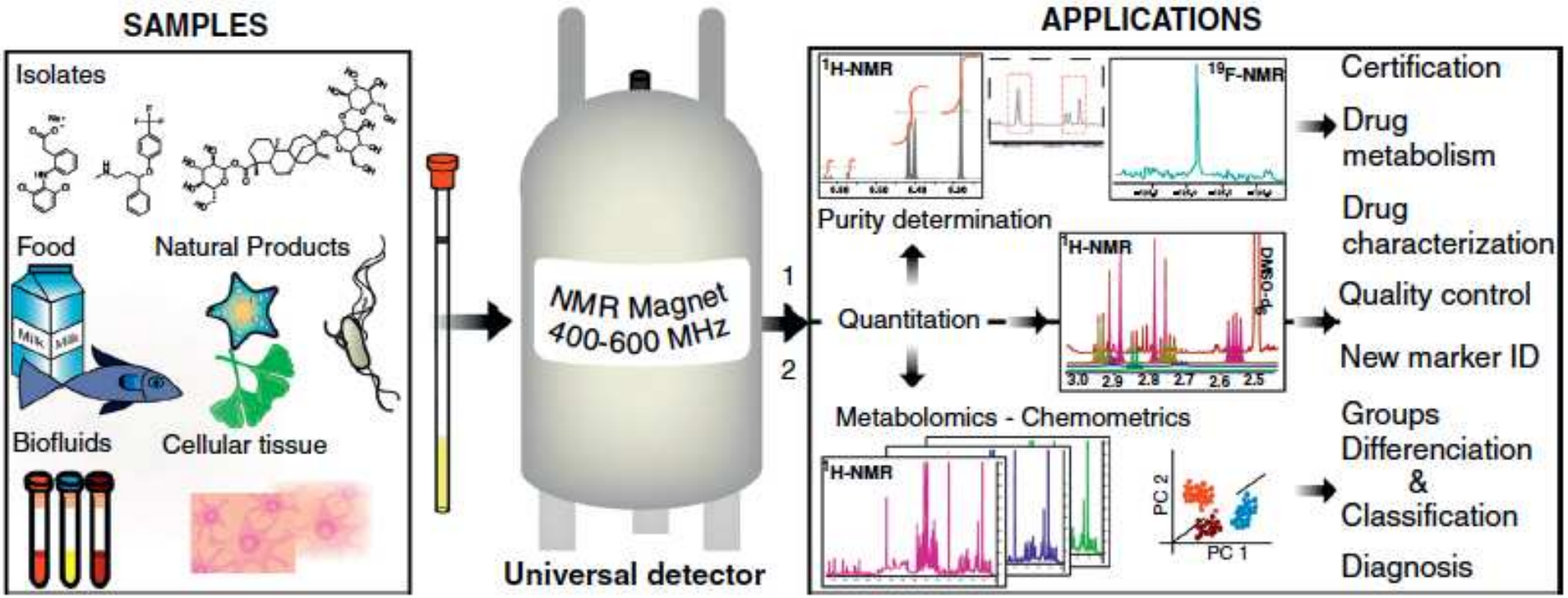


Figure 2. Development of the peer-reviewed literature on quantitative NMR (qNMR) since 1954

J Nat Prod. 75 (2012) 834–851


SAMPLES
Isolates
Food
Natural Products
Biofluids
Cellular tissue
NMR Magnet
400-600 MHz
Universal detector
1
2
APPLICATIONS
1H-NMR
19F-NMR
Purity determination
Quantitation
1H-NMR
DMSO-d6
3.0 2.9 2.8 2.7 2.6 2.5
Metabolomics - Chemometrics
1H-NMR
PC 2
PC 1
Certification
Drug metabolism
Drug characterization
Quality control
New marker ID
Groups Differenciation & Classification
Diagnosis