

Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät

Institut für Mathematik

Fachgebiet: Institut für Chemie

Betreuer: Prof. Dr. Ralf Zimmermann

Dipl. Saray Ly Verdú

(e-mail: lyverdu.saray@gmail.com)

Chemometric Data Analysis of Untargeted Metabolomic Profiling of Biological Samples by Two – dimensional Gas – Chromatography Mass-Spectrometry

Nonalcoholic fatty liver disease includes a range of liver conditions which main characteristic is an excess of fat storage in hepatic cells (steatohepatitis). It is related with development of type 2 diabetes and closely linked to metabolic syndrome. In this work, the study of liver mice sample are analysed by two-dimensional gas-chromatography Time-of-Flight mass-spectrometry. The complex data arising from the mouse model aimed to bring new insight in the development of the pre-diabetic stage in a metabolomic level. Anova Simultaneous Component Analysis (ASCA) is utilised as a chemometric tool to evaluate the data. Additionally, the spectra of application of both, GC×GC-ToFMS and multivariate analysis is enlarged by investigating wood type specific metabolites in aerosol sample from wood combustion. From this combination of power and versatility emerged the results; on the one hand the influence of blood-specific metabolites in liver tissue was shown and the variance emerging from the diet was discriminated from other variance sources while analysing liver tissue from mice fed with a specific fatty diet; on the other hand, aerosol metabolites from different wood type samples has been evaluated and their specificity has been determined.

Chemometrische Daten Analyse von Untargeted Metabolomic Profiling aus Biologischen Proben mit Zwei – dimensionales Gas – Chromatographie Mass-Spectrometrie

Die nichtalkoholische Fettleber ist eine Erkrankung, die sich durch verschiedene Störungen auszeichnet, deren Hauptcharakteristik ein Übermaß an Fettbevorratung in den Hepatozyten ist. Die Erkrankung geht einher mit der Typ-2-Diabetes und ist auch eine wichtige Komponente zur Ausbildung eines metabolischen Syndroms. In der vorliegenden Arbeit wurden Mäuseleber mit Hilfe der zweidimensionalen Gaschromatographie Flugzeitmassenspektrometrie (GC×GC-ToFMS) auf metabolischem Level untersucht. Die komplexen Metabolomics-Daten aus dem Mäusemodell sollten dabei neue Einsichten in die Entwicklung der prediabetischen Phase auf dem metabolischen Level erbringen. Zur Datenevaluierung wurde die Anova simultane Komponentenanalyse (ASCA) als chemometrisches Werkzeug eingesetzt. Das Potential dieser Applikation, die Kombination aus GC×GC-ToFMS mit der multivariaten Datenanalyse, wurde anhand von Holzdegenerationsprodukten in Verbrennungsaerosolen untersucht. Diese starke und vielseitige Methode offenbarte auf der einen Seite den Einfluss von blutspezifischen Metaboliten im Lebergewebe deren

Variabilität diskriminiert war beim Vergleich der Fettleber mit gesundem Lebergewebe; auf der anderen Seite konnte mit dieser Methode die deutlichen Unterschiede von verschiedenen Holzarten bei der Verbrennung und Bildung von Verbrennungsprodukten dargestellt werden.