

## ALLEGATO A

### GRUPPI e TEMATICHE DI RICERCA

#### Prof. G. Adami, Prof. E.Reisenhofer,

- 1) METODOLOGIE INNOVATIVE PER L'ANALISI E LA SPECIAZIONE CHIMICA DI METALLI IN CAMPIONI OTTENUTI DA ESPERIMENTI DI PERMEAZIONE CUTANEA E STUDI SULL'ASSORBIMENTO DI NANOPARTICELLE METALLICHE:

questa tematica di ricerca riguarda lo studio dell'assorbimento cutaneo in-vitro di sostanze tossiche. Per i test di permeazione viene utilizzato il metodo delle celle di diffusione di Franz. Nel 2010 sono continuati gli studi riguardanti l'indagine della penetrazione cutanea di nanoparticelle metalliche, visto il crescente interesse per i molti campi di applicazione delle nanotecnologie. Uno studio importante riguarda la penetrazione della nanoparticelle come tali nello strato cutaneo mediante tecniche ETAAS, ICP-AES e ICP-MS, microscopia elettronica a trasmissione (TEM) e microtomografia a raggi X alla luce di sincrotrone.

- 2) TECNICHE ANALITICHE INNOVATIVE PER LO STUDIO DEGLI INQUINANTI NEL PARTICOLATO ATMOSFERICO:

il particolato atmosferico (PM10 e PM2.5) è una matrice ambientale molto complessa e dunque, oltre al semplice monitoraggio della sua concentrazione nell'aria è importante anche la sua caratterizzazione chimica per individuare e quantificare il contenuto di elementi o composti chimici potenzialmente dannosi per la salute umana. I dati relativi al PM e alla sua composizione sono impiegati per sviluppare modelli a recettore che permettono di individuare e quantificare le possibili sorgenti. Si sono inoltre sviluppate nuove tecniche basate su metodi di analisi delle immagini per la determinazione della granulometria.

- 3) CHIMICA ANALITICA APPLICATA ALLO STUDIO DI NUOVI MATERIALI E NANOSISTEMI PER LA PRODUZIONE DI IDROGENO:

mediante tecniche spettroscopiche di assorbimento ed emissione atomica e tecniche elettroanalitiche sono stati condotti diversi studi e ricerche sulla caratterizzazione di questi nuovi materiali catalitici con particolare riferimento alla comprensione dei meccanismi di disattivazione di tali materiali a seguito di processi di leaching.

- 4) CHIMICA ANALITICA APPLICATA ALLO STUDIO DEI BENI CULTURALI:

nell'ambito dei rapporti di collaborazione tra il Dipartimento ed il Centro Regionale di Catalogazione e Restauro dei Beni Culturali della Regione Autonoma Friuli Venezia Giulia nel 2010 è continuata l'intensa collaborazione incentrata su diverse linee di ricerca: determinazione del pH superficiale della carta con microelettrodi di nuova generazione; studio dei processi di degradazione chimica relativi alla rimozione dei nastri adesivi da stampe, libri e manufatti cartacei; studio e caratterizzazione di inchiostri ferrogallici.

- 5) SVILUPPO DI NUOVI SISTEMI DI SVERNICIATURA CHIMICA CON SOLVENTI NON TOSSICI:

il gruppo di lavoro è formato da Università di Trieste, AREA di ricerca di Trieste e Regione Friuli Venezia Giulia. Nel 2008, nell'ambito del "Progetto SISTER", è stato avviato l'intervento di convalida che consisteva nella ottimizzazione di un nuovo sistema di sverniciatura, con prodotti svernicianti di ridotta tossicità, buona applicabilità ed efficacia a base di dimetilsolfossido e limonene applicati su strisce assorbenti e coprenti. Nel 2010 è stato depositato il brevetto internazionale PCT ed è stato avviato un progetto per la preparazione dei prototipi finanziato dal progetto Sister - Liaison Office.

PUBBLICAZIONI: 6

BREVETTI: 1

FINANZIAMENTI: SISTER-LIASON OFFICE: 10.000 EURO

#### Prof. Enzo Alessio – Dott. Barbara Milani, Dott. Gabriele Balducci, Dott. Elisabetta Iengo

- 1) SINTESI MODULARE DI SISTEMI MULTICROMOFORICI PER LA CONVERSIONE DI ENERGIA SOLARE.

Questa linea di ricerca riguarda la sintesi e caratterizzazione strutturale, sia in soluzione che allo stato solido, di sistemi multi-cromoforici (e.g. porfirine, perilene-bisimidi) mediati da centri metallici e lo sviluppo di nuovi composti di coordinazione per l'assemblaggio di sistemi supramolecolari. In particolare, si intende costruire addotti che si comportino come sistemi antenna e/o possano dare stati a separazione di carica in seguito a foto-eccitazione. La strategia di sintesi per ottenere tali sistemi nanoscopici di cromofori sfrutta la formazione di legami di coordinazione fra siti donatori periferici sulle porfirine e/o su perilene-bisimidi funzionalizzate (o altri cromofori organici) e centri metallici esterni. In particolare, l'uso di composti di coordinazione come unità connettive si è

dimostrato un metodo molto efficiente quando si vogliono progettare sistemi multicromoforici tridimensionali o, più in generale, strutture che definiscano cavità di forma e dimensioni ben definite.

## 2) SVILUPPO DI COMPOSTI ANTITUMORALI DI RUTENIO.

L'attività di ricerca riguarda sia la sintesi di nuovi composti di rutenio che abbiano potenziale attività antitumorale; vengono studiati in particolare composti di coordinazione di tipo 'half sandwich'. È noto che alcuni composti organometallici 'half sandwich' di Ru(II) di formula generale  $[Ru(\eta^6\text{-arene})(X)(L)]^+$  dove L è un chelante bidentato ed X è un gruppo uscente anionico, possiedono attività antitumorale *in vitro* ed *in vivo* verso modelli animali. La ricerca riguarda lo sviluppo di composti di coordinazione half sandwich strutturalmente simili a quelli organometallici nei quali l'arene viene sostituito o da un legante neutro facciale (*face-capping*) come il macrociclo solforato 1,4,7-tritriociclononano ([9]anoS3) o il corrispondente azotato 1,4,7-triamminociclononano ([9]anoN3) che tre leganti monodentati (e.g. dmsO) in geometria facciale. Inoltre vengono variati in modo sistematico sia il legante chelante che il gruppo uscente. Recentemente lo studio è stato esteso anche ai corrispondenti composti di osmio

## 3) SVILUPPO DI CATALIZZATORI OMOGENEI PER REAZIONI DI OLIGO- E POLIMERIZZAZIONE CONTROLLATA.

L'attività di ricerca ha riguardato lo sviluppo di catalizzatori omogenei basati su composti di coordinazione di palladio con leganti azotati che siano in grado di promuovere efficacemente ed in modo controllato reazioni di oligo- e polimerizzazione. Due sono le reazioni studiate: i. la copolimerizzazione del monossido di carbonio con vinil areni; ii. la copolimerizzazione di alcheni terminali con monomeri polari. Obiettivo principale della prima reazione è il controllo della stereochimica dei copolimeri prodotti. In particolare, nell'ultimo anno si è sviluppato un sistema catalitico basato su leganti tridentati con cui si è ottenuto, per la prima volta, il copolimero CO/stirene completamente sindiotattico. Per la seconda reazione, obiettivo principale è lo sviluppo di catalizzatori che la promuovano in modo efficiente ed incorporando il monomero polare nella catena polimerica principale. I catalizzatori studiati si basano su alfa-diimine non simmetriche.

PUBBLICAZIONI: 6

FINANZIAMENTI:

- Reintegration Grant 2008 – 2011 (Dr. E. Iengo): 45.000 euro
- PRIN bando 2007, MIUR, 64285 € (comprensivo della quota di cofinanziamento), 2008, biennale.

### **Dott. Fioretta Asaro**

#### 1. Indagini mediante spettroscopia NMR multinucleare di struttura e dinamica di materia soffice condensata

Le misure dei coefficienti di autodiffusione mediante PGSTE NMR hanno permesso di chiarire la microstruttura della fase micellare del sistema polimero/tensioattivo Pluronic L64/dodecilsolfato di sodio.

Sono stati condotti studi *in situ*, mediante  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ , PGSTE NMR e spettroscopia IR, per seguire l'evoluzione del sistema microemulsione inversa igepal-cicloesano-soluzione acquosa acida durante il processo sol-gel per l'ottenimento di nanoparticelle di silice, con tetraetossisilano come precursore, e mettere a punto le condizioni ottimali di sintesi. Questa metodica si è dimostrata efficace per la produzione di  $\text{SiO}_2$  di dimensioni nanometriche in condizioni di catalisi acida. È da sottolineare il gel di silice che si ottiene dalla reazione condotta in soluzione idroalcolica in presenza di acido è costituito da aggregati di  $\text{SiO}_2$  molto grandi. Il risultato, quindi, è di notevole rilievo in quanto le particelle di dimensioni nanometriche hanno proprietà peculiari, non condivise dal materiale bulk. Il materiale in questione potrebbe trovare applicazioni per le sue proprietà ottiche ed in catalisi, qualora dopato con ioni dei metalli di transizione (e ricerche in questo senso sono attualmente in atto).

PUBBLICAZIONI: 2

### **Dr. P. Barbieri – Gruppo di Ricerca in Chimica Ambientale**

Il gruppo studia la presenza, la reattività ed il destino di specie chimiche gassose, disciolte e particellate in atmosfera con metodi computazionali, caratterizzazioni in laboratorio e in ambienti aperti. Lo sviluppo di soluzioni analitiche rapide, accurate e sensibili con particolare attenzione a microcostituenti organiche in matrici complesse è uno dei fondamenti dell'attività del gruppo. La valutazione del bioaccumulo e del rischio in siti contaminati e lo studio di tecnologie non convenzionali per la messa in sicurezza e bonifica dell'inquinamento è un ulteriore oggetto di attività di ricerca.

#### PROGETTI

- 1) "Valutazione delle emissioni dalla combustione domestica di biomasse legnose: sviluppo di sistemi di campionamento e studi sperimentali su sistemi tradizionali e tecnologie di mitigazione delle emissioni"

nell'ambito del PRIN 2008 "La combustione della legna come fonte di energia primaria: sviluppo di metodologie integrate per la valutazione di rischi e benefici" MIUR (LENS: Legna, ENergia, Salute; coordinatore Prof. Demetrio Pitea) 2010;

- 2) "Igienizzazione dei filtri presenti all'interno di cappa d'aspirazione e trattamento dei vapori captati che vengono generati durante la cottura dei cibi in ambiente domestico mediante l'utilizzo di adeguata e controllata quantità di ozono, al fine di elevare qualità e salubrità dell'aria all'interno dell'abitazione e/o di suoi specifici locali", Microfox Srl-Falmec Spa (P.Barbieri responsabile scientifico) 2010;
- 3) "Monitoraggio Ambientale Distribuito Basato su reti a Grid: MADBAG" commessa da Sincrotrone Trieste su progetto Regione FVG (coordinatore Dr. Edoardo Busetto) 2009-2010;
- 4) "Valutazione della qualità dell'aria nel Comune di Manzano" (P.Barbieri responsabile scientifico) 2009-2010;
- 5) "Valutazione su emissioni di particolato atmosferico dalla combustione di pellet da biomassa innovativa" Fumisteria FerCasa s.a.s (P.Barbieri responsabile scientifico) 2009-2010;
- 6) "Ottimizzazione di metodiche olfattometriche per la determinazione delle emissioni osmogene" Lenviros srl (referente Dott.ssa Lucrezia De Gennaro) (Programma Operativo Regionale Puglia 2009);
- 7) "Valutazione quantitativa delle capacità di specie arbustive e arboree ai fini della mitigazione dell'inquinamento atmosferico in ambiente urbano e periurbano", progetto finanziato dal Ministero delle Politiche Agricole Alimentari e Forestali per il triennio 2010-2012, collaborazione con il Dipartimento di Scienze Agrarie ed Ambientali dell'Università di Udine (DISA). Responsabile scientifico per il DSCH: dr. P. Barbieri; responsabile scientifico per il DISA: dr. L. Marchiol; coordinatore: prof. G. Zerbi (DISA)
- 8) "Biomonitoraggio con gasteropodi terrestri", Università di Trieste Fondo Giovani 2009-2010 (P.Barbieri responsabile scientifico);
- 9) Attualizzazione del piano di caratterizzazione del sito contaminato costiero "Acquario" Comune di Muggia, 2008-2010 (P.Barbieri responsabile scientifico);

PUBBLICAZIONI: 3

### **Prof. Fabio Benedetti Dott. Federico Berti**

#### 1) SINTESI STEREOSELETTIVA DI ISOSTERI DIPEPTIDICI:

nel corso del 2010 sono state sviluppate nuove metodologie per la sintesi stereoselettiva di isosteridipeptidici di tipo monoidrossietilenico, basate su reazioni di ring closing methathesis tra olefine montate su scaffolds via legami di tipo carbammico, e su approcci di tipo combinatoriale per la preparazione di piccole librerie di inibitori della HIV1 proteasi.

#### 2) PICCOLI PEPTIDI PER LO SVILUPPO DI BIOSENSORI:

è stato sviluppato un progetto di ricerca per la preparazione di piccoli recettori peptidici rivolti verso farmaci utilizzati nella terapia dell'AIDS e composti bioattivi presenti nel caffè. Sono state preparati peptidi basati su uno scaffold di tipo coiled-coil, peptidi derivati dalla sequenza dell'albumina umana, e decapeptidi progettati in base a predizioni teoriche della loro affinità per i ligandi.

#### 3) ALBUMINE COME AUSILIARI E BIOCATALIZZATORI:

è stata caratterizzata l'attività dell'albumina umana e bovina come ausiliario nella riduzione diastereoselettiva di dicetoni e come catalizzatore nell'addizione aldolica stereoselettiva di acetone ad aldeidi aromatiche.

PUBBLICAZIONI: 4

FINANZIAMENTI:

- Fondo Trieste – progetto "Piccoli peptidi per lo sviluppo di biosensori" (F. Berti) Euro 240.000,00
- Regione Autonoma Friuli – Venezia Giulia – progetto "Rete regionale per la ricerca di farmaci antiinfettivi". (F. Benedetti - Euro 16.000)
- Prin 2008 "Sintesi e valutazione di inibitori peptidomimetici di proteasi virali e prolipeptidasi " (F. Benedetti – Euro 40.000)
- Contratto "Italiana membrane s.p.a." (F. Berti) – Euro 43.000,00

### **Prof. Francesca Cateni, Dott. Marina Zacchigna**

#### 1) POLIETILENGLICOLE E PHOTOSENSITIZER

Nuovi MultiPEG per la veicolazione di molecole.

Sintesi di molecole foto-attive "intelligenti", cioè ad alta capacità di produzione di ossigeno singoletto e capaci di accumularsi preferenzialmente nelle cellule tumorali.

MultiPEGlegati a derivati delle squaraine e a molecole di tipo monosaccaridico in modo da renderli maggiormente selettivi per le cellule tumorali.

## 2) ISOLAMENTO E DETERMINAZIONE STRUTTURALE DI PRODOTTI NATURALI DA BASIDIOMICETI QUALI INIBITORI DELLA TROMBINA

La presente ricerca si basa sulla necessità di scoprire nuovi, sicuri, selettivi e potenti inibitori della trombina specialmente con nuove strutture.

PUBBLICAZIONI: 5

FINANZIAMENTI:

- 2009: Progetto regione FVG "Sviluppo di nuovi farmaci da utilizzare nella terapia fotodinamica del cancro" budget 19.243,00 euro; durata 2 anni

### Prof. Piero Decleva, Prof. Giovanna Fronzoni, Prof. Mauro Stener, Dott. Sonia Coriani.

#### 1) FOTOIONIZZAZIONE E FOTOASSORBIMENTO MOLECOLARE.

Questa tematica ha riguardato l'applicazione del metodo TDDFT in base di funzioni B-spline multicentriche per il continuo elettronico, sviluppato dal gruppo di ricerca e parallelizzato per sfruttare l'architettura del supercomputer IBM SP6 del Cineca. E' stata studiata la distribuzione angolare dei fotoelettroni da ionizzazioni di core da molecole orientate ( $N_2O$  e  $C_2H_4$ ), in collaborazione con un gruppo sperimentale giapponese e uno americano. E' stato studiato fotoassorbimento di  $SF_5CF_3$ , in collaborazione con il gruppo di fase gassosa del sincrotrone Elettra. Sono stati approfonditi vari aspetti relativi al fotoassorbimento e alla fotoionizzazione dei fullereni, in particolare sono stati studiati gli effetti non-dipolari nella fotoionizzazione del  $C_{60}$ , e' stato effettuato uno studio comparativo sulla fotoionizzazione di  $C_{60}$  e  $C_{70}$  in fase gassosa o adsorbiti su film sottile, infine e' stata studiata la fotoionizzazione di  $C_{70}$  su Al. Lo studio della fotoionizzazione e' stato inoltre esteso al caso di laser molto intensi e alle distribuzioni angolari di fotoelettroni di atomi di Ne polarizzati.

#### 2) PROPRIETÀ DI SISTEMI ESTESI E CLUSTER.

E' stato iniziato lo studio del fotoassorbimento di raggi X della soglia  $L_{2,3}$  del Ti nel bulk e nella superficie di  $TiO_2$ , e della soglia L di S dei tiolati adsorbiti su una serie di cluster di oro, utilizzando il metodo TDDFT per gli stati legati implementato nel codice ADF, includendo l'accoppiamento Spin-Orbita (SO) nel caso dei metalli. Inoltre e' stato iniziato lo studio delle soglie  $L_{2,3}$  di V in  $V_2O_5$  (bulk e superficie) sempre con metodo TDDFT includendo l'accoppiamento SO. Infine si e' iniziato lo studio del fotoassorbimento delle soglie K di C e N in una serie di ftalocianine metalliche, con metodo transition-state Kohn-Sham.

#### 3) PROPRIETÀ DI RISPOSTA MOLECOLARE A CAMPI ELETTROMAGNETICI.

Estensione del codice di risposta lineare TDDFT linear-scaling in Dalton al calcolo di proprietà di risposta dipendenti dalla frequenza d'ordine superiore, anche con uso di set di base dipendenti dalla perturbazione, in particolare per proprietà magneto-ottiche. Applicazione a: (i) simulazione di spettri Coherent anti-Stokes Raman Scattering (CARS) di una serie di idrocarburi poliaromatici, (iii) determinazione gauge-invariante delle ipermagnetizzabilità miste magnetico-elettriche dipendenti dalla frequenza che razionalizzano l'effetto Cotton-Mouton in benzene e diversi fluorobenzoni, e l'effetto Buckingham in naftalene, fluorobenzene e furano, (iv) la simulazione della rotazione magneto-ottica e degli spettri di dicroismo circolare magnetico (MCD) in svariati sistemi molecolari.

PUBBLICAZIONI: 11

FINANZIAMENTI:

- PRIN 2008: "MODELLI TEORICI E STUDI COMPUTAZIONALI DI OSSERVABILI SPETTROSCOPICHE DI SISTEMI CONDENSATI" Responsabile scientifico locale : FRONZONI Giovanna, Università di Trieste; Cofin Totale : 51.653 euro
- Progetti di calcolo presentati dal gruppo di ricerca (Prof. Stener): IS CRA di tipo B al Cineca (Bologna) per 130000 ore di calcolo su IBM-SP6. CASPUR HPC grant 2010 su cluster linuxmatrix.
- Convenzione tra UniTS e il Cineca per accedere ad ulteriori risorse di calcolo su SP6 al Cineca (circa 80000 ore).
- Progetto di mobilità e supercalcolo HPC-Europe2 per due laureandi della laurea magistrale (piano di studio TCCM) di accedere al supercomputer IBM-SP6 Huygens del centro di calcolo SARA (Amsterdam) e a coprire le spese di permanenza a Groningen per la preparazione di una parte del lavoro di tesi.

### **Dott. Erica Farnetti**

**Studio di processi catalitici per la valorizzazione del glicerolo.** Studio di trasformazioni selettive del glicerolo catalizzate da composti di metalli di transizione, in fase omogenea o eterogenea. In particolare sono stati messi a punto sistemi catalitici che promuovono (i) la deidrogenazione selettiva in condizioni di trasferimento di idrogeno, (ii) la formazione di acetali e chetali ciclici del glicerolo.

PUBBLICAZIONI: 3

FINANZIAMENTI:

- FIRB bando 2006 (vedi fondi J. Kaspar).
- Donazione della Fondazione Kathleen Foreman Casali (2007) € 13000.

### **Prof. Paolo Fornasiero**

- 1) SVILUPPO DI MATERIALI NANO STRUTTURATI PER LA CATALISI E L'ENERGIA
- 2) SVILUPPO DI MATERIALI DA IMPIEGARSI NEL CAMPO DELLA PRODUZIONE DI ENERGIA E DELLA CATALISI AMBIENTALE.
- 3) SVILUPPO DI PROCESSI SOSTENIBILI PER LA PRODUZIONE DI IDROGENO A PARTIRE DA MATERIE PRIME DI SECONDA GENERAZIONE, QUALI IL GLICEROLO E ZUCCHERI OTTENUTI DALL'IDROLISI DI SCARTI LIGNO-CELLULOSICI (GLUCOSIO).
- 4) PREPARAZIONE, CARATTERIZZAZIONE E TEST DELL'ATTIVITÀ DI CATALIZZATORI ETEROGENEI IN PROCESSI DI REFORMING TERMICO E FOTOCATALITICO.
- 5) REALIZZAZIONE DI NANO COMPOSITI DI TIPO CORE-SHELL CON INNOVATIVE PROPRIETÀ CATALITICHE.
- 6) STUDIO DI CATALIZZATORI EFFICIENTI PER LA PRODUZIONE DI H<sub>2</sub> TRAMITE OSSIDAZIONE PARZIALE DEL METANO, MATERIALI INNOVATIVI PER SOFC E FOTOCATALIZZATORI PER LA DECONTAMINAZIONE DI ACQUE INQUINATE, CON CONTEMPORANEA PRODUZIONE DI IDROGENO. COMPrensione DEI RELATIVI MECCANISMI DI REAZIONE.

PUBBLICAZIONI: 13

FINANZIAMENTI:

- Progetto Regione Friuli Venezia Giulia 2009 – 30.000 Euro
- PRIN 2007, 68.790, 2008, biennale (Settembre 2008-settembre 2010)
- ICCOM-CNR – 25.000

### **Prof. Lucia Gardossi, prof. Cynthia Ebert**

- 1) INTEGRAZIONE DI METODI COMPUTAZIONALI E SPERIMENTALI PER LO SVILUPPO RAZIONALE DI BIOCATALIZZATORI IMMOBILIZZATI.
- 2) APPROCCI CINETICI E COMPUTAZIONALI NELLO STUDIO DELLA SELETTIVITÀ ENZIMATICA.
- 3) STUDIO COMPUTAZIONALE DELL'EFFETTO DEL SOLVENTE SULL'ATTIVITÀ E STABILITÀ ENZIMATICA.
- 4) PROCESSI ENZIMATICI PER LA TRASFORMAZIONE DI BIOMASSE.
- 5) SINTESI ENZIMATICA E CARATTERIZZAZIONE DELLE PROPRIETÀ CHIMICO FISICHE DI POLIMERI BIODEGRADABILI
- 6) SINTESI IN FASE SOLIDA DI PEPTIDI FARMACOLOGICAMENTE ATTIVI.

PUBBLICAZIONI: 6

BREVETTI: 1

FINANZIAMENTI:

- Contributo EU approvato € 1.999.995 per 3 anni quale coordinatore del progetto Europeo "IRENE" (In silicoRationalEngineering of NovelEnzymes, projectnumber 227279).FP7 CooperationProgrammeSpecific International Cooperation Action" with Russia. Progetto approvato (Budget: 4Milioni € per 3 anni, 11 partners,).
- Contratto Esteco S.r.l., Trieste – 10.000€
- Contratto SPRIN s.r.l. – 20.000€

## **Prof. Silvano Geremia**

### 1) SISTEMI SUPRAMOLECOLARI HOST-GUEST.

La tematica riguarda la sintesi non covalente e la caratterizzazione strutturale di sistemi host-guest mediante tecniche cristallografiche. Nel corso dell'anno 2010 si sono ottenuti e caratterizzati una serie di cristalli di sistemi supramolecolari, mediante screening automatizzato su larga scala di molecole con funzionalità host, di tipo calixarenico e resorcinarenico, complessate con molecole con funzionalità guest, contenenti gruppi metil-piridinici o alcolici. In particolare, i principali risultati della ricerca hanno riguardato: la funzionalizzazione di cristalli nanoporosi di sistemi supramolecolari a base porfirina/cavitando mediante diffusione di ioni e la caratterizzazione di nuovi polimeri supramolecolari basati sull'interazione host-guest, studio effettuato in collaborazione con il Prof. Dal Canale dell'Università degli Studi di Parma e col il Prof. Melchiorre Parisi dell'Università di Messina.

### 2) PROGETTAZIONE, SINTESI E CARATTERIZZAZIONE DI DERIVATI BIOCONIUGATI DELLA COBALAMINA QUALI AGENTI DI CONTRASTO PER L'IMAGING E LA SOMMINISTRAZIONE DI FARMACI CITOTOSSICI.

Due derivati bioconiugati della cobalamina sono stati ottenuti sfruttando l'esterificazione del gruppo 5'-OH da parte di molecole dotate di gruppi carbossilici ed esaurientemente caratterizzati in soluzione tramite spettroscopia UV-vis, <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C NMR (1D e 2D), spettrometria di massa ES-MS ed elettroforesi. I derivati bioconiugati sono stati metallati con Gd e i metalloderivati sono stati caratterizzati in soluzione tramite elettroforesi e ES-MS. E' stata determinata la struttura allo stato solido del complesso dinucleare derivante dalla cristallizzazione di uno dei bioconiugati in presenza di un eccesso di Gd<sup>3+</sup>. E' stata valutata qualitativamente la costante di stabilità del complesso tramite elettroforesi. In collaborazione con il gruppo del Prof. Aime dell'Università di Torino sono state studiate la reazione di idrolisi del legame estereo tramite metodo rilassometrico, per valutare l'effettiva utilizzabilità in vivo del bioconiugato, ed il processo di internalizzazione di CNCbl-DTPAGd e CNCbl-TTHAGd in varie linee cellulari, per valutarne le eventuali caratteristiche antitumorali. In collaborazione con il Prof. Fedosov dell'università di Aarhus, DK, è stata valutata l'affinità dei bioconiugati nei riguardi della transcobalamina.

### 3) STUDI BIOCRISTALLOGRAFICI DI PROTEINE.

E' proseguito lo studio strutturale della proteasi HIV e di alcune sue varianti associate alla farmaco resistenza complessate con farmaci e nuovi inibitori. Nel corso del 2010 si sono ottenute le strutture cristalline di alcuni nuovi complessi proteina/inibitore. In particolare, si sono studiati dei nuovi inibitori forniti della Prof.ssa Maria Funicello dell'Università della Basilicata. Questi inibitori sono basati sulla funzionalità sulfonammidica legata ai gruppi anilino e sec-butilico connesso con un gruppo indolico. L'immagine del sito attivo ottenuta mediante le tecniche biocristallografiche del complesso enzima/inibitore ha permesso di ottenere importanti informazioni sulle interazioni intermolecolari presenti in questi sistemi. E' continuata la collaborazione con il Centro di Riferimento Oncologico di Aviano nell'ambito dello studio di malattie associate all'infezione di virus HCV che degenerano in linfomi non-Hodgkin che ha portato allo sviluppo di un anticorpo miniaturizzato, MALOT in corso di purificazione.

PUBBLICAZIONI: 8

FINANZIAMENTI:

- "Rete Regionale per la Ricerca e sviluppo di nuovi Agenti terapeutici Antinfettivi Regione" Friuli-Venezia Giulia LR 11/2003, bando 2006. 18.000 Euro.

## **Dott. Teresa Gianferrara**

### 1) SVILUPPO DI CONIUGATI IDROSOLUBILI METALLO-PORFIRINICI CON POTENZIALE ATTIVITÀ BIOLOGICA.

Il progetto di ricerca riguarda la sintesi di composti innovativi che possano essere usati nella terapia fotodinamica (PDT) dei tumori. Il principio su cui si basa questa terapia è l'assorbimento di luce visibile da parte di fotosensibilizzatori (ad esempio porfirine) che vengono così attivati e generano agenti citotossici, il più importante dei quali è l'ossigeno singoletto. Il progetto ha portato alla sintesi di coniugati rutenio-porfirinici, cioè porfirine che portino coordinati in posizione periferica composti di coordinazione di Ru(II) idrosolubili, allo scopo di abbinare l'effetto fototossico del fotosensibilizzatore porfirinico con la citotossicità del composto inorganico. Gli studi preliminari di citotossicità e fotocitotossicità di alcuni coniugati rutenio-porfirine hanno fornito risultati incoraggianti. L'introduzione in questi coniugati di un elemento di targeting molecolare come l'acido folico può aumentare la selettività dei coniugati per le cellule tumorali. Con questa finalità sono stati innanzitutto sintetizzati e caratterizzati dei derivati dell'acido folico recanti leganti bidentati e tridentati che servono da modello per studiare la coniugazione con i complessi di Ru(II).

PUBBLICAZIONI: 1

FINANZIAMENTI:

- Fondazione Casali 10000 €

### **Prof. Jan Kaspar., Dr. N. Hickey**

#### 1. Catalisi eterogenea ambientale e nanomateriali

In collaborazione con Nanoxers.r.l, sono stati focalizzati problemi relativi allo sviluppo di materiali nanostrutturati a base di ossidi di  $Al_2O_3$  ed i loro compositi con proprietà di tipo Aerogel-like. Sono state analizzate le metodologie di ingegnerizzazione dell'ossido nanocomposito in un prodotto isolante, ininfiammabile e ad elevata stabilità termica. Sono state studiate applicazioni di catalizzatori strutturati per abbattimento fotocatalitico di inquinanti. Nell'ambito della catalisi ambientale (progetti ECOMOS FAR e ECOMOS FIRB) è stato messo a punto e testato un impianto pilota e sono state studiate effetti dei parametri del processo sul abbattimento di fumi da motore diesel. E' stato anche condotto uno studio di catalizzatori per la conversione di  $NO_x$  in presenza di  $SO_2$ .

In collaborazione con la ditta Alder sono state affrontate problematiche relative alla produzione di catalizzatori per l'ossidazione di metanolo.

In collaborazione con dr. Farnetti è stato condotto uno studio di valorizzazione di glicerolo.

PUBBLICAZIONI: 2

FINANZIAMENTI:

- Progetto ECOMOS FAR e ECOMOS FIRB, Progetto RINAVE.

### **Prof. Lucia Lassiani, Prof. Antonios Varnavas, Prof. Giorgio Stefancich**

Progettazione e sintesi di ligandi recettoriali del sistema peptidergico

#### 1) RICERCA E SVILUPPO DI ANTAGONISTI SELETTIVI PER I RECETTORI DELLA COLECISTOCHININA

Progettazione, sintesi e valutazione biologica (*in vitro* e *in vivo*) di antagonisti di tipo non peptidico dei recettori centrali e periferici della colecistochinina. Costruzione del modello farmacoforico tridimensionale necessario per il riconoscimento delle singole isoforme recettoriali. Studio dell'allotropismo dinamico dei recettori CCK1 nei confronti dei ligandi progettati.

#### 2) RICERCA E SVILUPPO DI AGONISTI PER I RECETTORI OPIOIDI

Progettazione, sintesi e valutazione biologica (*in vitro* e *in vivo*) di agonisti di tipo non peptidico dei recettori oppioidi. Le molecole progettate derivano da un arrangiamento sinologico di gruppi farmacofori degli antagonisti dei recettori CCK1.

#### 3) RICERCA E SVILUPPO DI LIGANDI RECETTORIALI DUALI CCK- OPIOIDI

Progettazione, sintesi e valutazione biologica (*in vitro* e *in vivo*) di ligandi duali per i recettori della CCK e degli oppioidi. L'antagonismo CCKergico accompagnato da un simultaneo agonismo oppioide si considera una delle strategie possibili per il trattamento del dolore neuropatico morfino resistente.

#### 4) RICERCA E SVILUPPO DI ANTAGONISTI PER I RECETTORI AT1 DELL'ATII

Progettazione, sintesi e valutazione biologica di antagonisti di tipo non peptidico dei recettori AT1 dell'angiotensina II. Le molecole progettate derivano dall'incorporazione di aminoacidi non proteinogenici nel telaio classico degli sartani.

### **Prof. Maria Grazia Mamolo, Dott. Daniele Zampieri**

#### 1) PROGETTAZIONE, SINTESI E SVILUPPO DI NUOVI DERIVATI QUALI LIGANDI DEL RECETTORE SIGMA.

Il gruppo di ricerca si occupa della sintesi e dell'attività di nuovi derivati quali ligandi di entrambi i sottotipi recettoriali,  $\sigma_1$  e  $\sigma_2$ . La ricerca è accompagnata da uno studio correlato di molecular modeling che ha permesso di sviluppare nuovi modelli farmacoforici per entrambi i due sottotipi recettoriali, nonché un modello 3D, per omologia, del recettore  $\sigma_1$ .

PUBBLICAZIONI: 3

**Prof.ssa Mariarosa Moneghini; dott. Guglielmo Zingone**

- 1) STUDI DI PREFORMULAZIONE CONSISTENTI NELLA CARATTERIZZAZIONE DELLO STATO SOLIDO DI PRINCIPI ATTIVI VEICOLATI IN DISPERSIONI SOLIDE
- 2) SVILUPPO DI FORME FARMACEUTICHE SOLIDE AD USO ORALE
- 3) APPLICAZIONE DELLE MICROONDE ALLA PREPARAZIONE DI COMPOSTI FARMACO-CARRIER
- 4) PRECIPITAZIONE DI PRINCIPI ATTIVI E PREPARAZIONI DI SISTEMI BINARI MEDIANTE TECNICHE DI PRECIPITAZIONE O IMPREGNAZIONE CON SOLVENTE SUPERCRITICO E SUCCESSIVA CARATTERIZZAZIONE CHIMICO-FISICA E DISSOLUTIVA
- 5) CARATTERIZZAZIONE DI COMPLESSI DI INCLUSIONE FARMACO-CICLODESTRINE

PUBBLICAZIONI: 3

**Prof. Lucia Pasquato**

- 1) SINTESI E STUDIO DI NANOPARTICELLE METALLICHE; PASSIVAZIONE DELLA SUPERFICIE CON MONOSTRATI ORGANICI, APPLICAZIONI IN CHIMICA DEI MATERIALI E IN BIOCHIMICA.

L'obiettivo principale del progetto di ricerca consiste nella realizzazione di sistemi multifunzionali basati su nanoparticelle di oro protette da un monostrato organico. Il monostrato che passiva la superficie del metallo è progettato per presentare delle caratteristiche tali da permeare le membrane cellulari, trasportare biomolecole, possedere elementi di riconoscimento specifico ed inoltre rendere le nanoparticelle facilmente visualizzabili in vivo. L'elemento di novità del nostro approccio consiste nell'utilizzo di monostrati misti composti da tioli idrogenati e tioli perfluorurati per il controllo della topologia dei leganti nel monostrato e per poter visualizzare le nanoparticelle con tecniche di imaging.

- 2) NANOPARTICELLE DI ORO PROTETTE DA UN MONOSTRATO ORGANICO PER LA REALIZZAZIONE DI CATALIZZATORI DI OSSIDAZIONE

Questo progetto, condotto in collaborazione con il gruppo di ricerca del Prof. P. Fornasiero di questo Dipartimento, ha come obiettivo la realizzazione di efficienti catalizzatori eterogenei di ossidazione formati da nanoparticelle di oro supportate o meglio inglobate in una matrice di ossidi di metalli di transizione. La strategia di sintesi richiede: i) nanoparticelle di oro di dimensioni piccole, minori di 2 nm, e monodisperse e ii) l'accrescimento del supporto intorno alle nanoparticelle. A questo scopo è necessario utilizzare nanoparticelle protette da un monostrato organico opportunamente strutturato.

- 3) STUDIO DI REAZIONI USATE NELLA SINTESI DI COMPOSTI DI CHIMICA FINE

Il progetto, in collaborazione con ZaChsystem, riguarda lo studio di processi innovativi per la sintesi di composti di chimica fine. Per esempio, nel corso del 2010 sono stati effettuati studi su processi di risoluzione cinetica dinamica, reazioni di Michael stereoselettive e reazioni di ossidazione stereoselettive.

PUBBLICAZIONI: 4

FINANZIAMENTI:

- Progetto Regione, 80.000 Euro, anno di assegnazione: 2008, 1 anno.
- Contratto ZaCh System: 30.000 Euro

**Prof. Giuliana Pitacco, Prof. Patrizia Nitti, Prof. Fulvia Felluga, Dott. Cristina Forzato.**

1. Progettazione, sintesi e reattività di composti enantiomericamente puri, building block per sistemi bioattivi.

Una parte del progetto ha riguardato la sintesi enantioselettiva di  $\alpha$ -metilene- $\beta$ -lattoni, acidi isoparacetonici e alcoli omoallilici che sono stati sintetizzati attraverso risoluzione cinetica enzimatica di substrati contenenti la funzionalità esterea o ossidrilica. E' stata inoltre sviluppata la sintesi enantioselettiva di acidi  $\beta$ -amminobutirrici otticamente attivi con un centro chirale quaternario.

Un'altra parte ha riguardato la sintesi di 1,4-diidropiridazine chirali non-racemiche preparate per reazione di 1,2-diaza-1,3-dieni con arilacetaldedi in condizioni di organocatalisi e lo studio di reazioni catalizzate da prolina tra composti  $\alpha$ -dicarbonilici, come il 2,3-butanedione e l'1,2-cicloesandione, e il  $\alpha$ -nitrostirene per la formazione di pirrolizidine.

2. Sintesi chemoenzimatica di leganti pincer chirali.

Il progetto riguarda la sintesi stereoselettiva di leganti terdentati chirali per l'ottenimento di complessi metallici usati in catalisi asimmetrica. In particolare è stata messa a punto la sintesi della 2-aminometilbenzo[h]chinolina e di un set di leganti a struttura 2-aminometil-6-arilpiridinica, preparati in forma otticamente pura con buone rese attraverso la risoluzione cinetica dinamica dei corrispondenti alcoli secondari racemi, o, in maniera enantiocomplementare, via riduzione con il lievito di birra dei precursori chetonici. I complessi di Ru(II) e Os(II) di questi leganti, in associazione con difosfine, hanno mostrato un'elevata attività nella riduzione di acetofenone in trasferimento di idrogeno, (TOF fino a  $10^5 \text{ h}^{-1}$ ) e una buona enantioselettività, con formazione dell'alcol corrispondente con il 90% e.e. Con procedura analoga sono stati preparati in entrambe le forme enantiomeriche leganti a struttura 2-idrossimetilbipiridinica, i cui complessi di Pd (II) si sono rivelati efficienti catalizzatori in reazioni di oligomerizzazione CO/stirene.

PUBBLICAZIONI: 7

FINANZIAMENTI:

- PRIN bando 2007: 46080 Euro (comprensivo della quota di cofinanziamento)

### **Prof. Maurizio Prato, Dott. Tatiana Da Ros, Dott. Davide Bonifazi**

#### 1) NANOSTRUTTURE DI CARBONIO: SINTESI, CARATTERIZZAZIONE E APPLICAZIONI DI NUOVI DERIVATI

Le nanostrutture di carbonio quali fullereni, nanotubi e grafene possono essere funzionalizzate mediante approccio covalente, utilizzando soprattutto reazioni di cicloadizione e di ossidazione seguite queste ultime da reazioni di condensazione sui residui acidi. I derivati così ottenuti mostrano generalmente una migliorata solubilità sia in solventi organici che acquosi rendendo i composti più facilmente maneggiabili e, in molti casi, biocompatibili. I derivati sono stati utilizzati in tre principali campi di ricerca: quali vettori per farmaci, quali supporti per la crescita neuronale e nel campo dei materiali.

#### 2) CHIMICA SUPRAMOLECOLARE: SINTESI, CARATTERIZZAZIONE E APPLICAZIONI DI NUOVI DERIVATI

Sintesi organica orientata alla preparazione di sistemi complessi che si autoassemblano su superfici come risultato di interazioni deboli come legame idrogeno, p-p stacking, ecc. Sistemi cromoforici che possono dar luogo a reazioni di trasferimento elettronico o di energia. Sintesi di PNA per la strutturazione predefinita di sistemi complessi.

PUBBLICAZIONI: 32

FINANZIAMENTI:

- Progetto LIMALTO: attività conto terzi
- Convenzione ENEA: "Sintesi di derivati fullerenici e nanostrutture di carbonio per celle fotovoltaiche organiche"
- Progetto ERC- VII PQ- CARBONANOBIDGE (ERC-2008-AdG-227135) "*Neuron Networking with Nano Bridges via the Synthesis and Integration*"
- Progetto SP1- Collaborative Project- VII PQ - ANTICARB (HEALTH-F2-2008-201587) "*Monoclonal ANTI body-targeted CARBon nanotubes against cancer*"
- Progetto PRIN 2008 Prot. 20085M27SS "*Nanostrutture ibride di carbonio per materiali funzionali*"
- Progetto Marie Curie PRAIRES "*Supramolecular hierarchical self-assembly of organic molecules onto surfaces towards bottom-up nanodevices: a host-driven action*"
- Progetto VIGONI "Sintesi selettiva di bisaddottifullerenici governata da macchine molecolari"
- Progetto REGIONE NANOCANCER "Nuove strategie nanotecnologiche antitumorali"

### **Prof. Gianpiero Spalluto**

Progettazione, sintesi e valutazione biologica di sistemi polietero ciclici quali antagonisti per i recettori adenosinici

PUBBLICAZIONI: 8

FINANZIAMENTI:

- PRIN 2008
- FARMEC

## **Dott. Claudio Tavagnacco, Prof. Renata Dreos**

### 1) ELETTRICITÀ DI COMPLESSI DEL CO

Ricerca in collaborazione con la Prof. R.Dreos, Dott. P.Siega, Dott. Giovanni Canil (laureando) e Dott. Gabriele Castaldo (laureando) del Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche, Università di Trieste.

Complessi del Co(II) e del Co(III) sono stati argomento di studio da parte di molti gruppi di ricerca di questo Dipartimento, sia come modelli della Vit. B<sub>12</sub>, che come trasportatori o attivatori di O<sub>2</sub>, che come catalizzatori di polimerizzazione e di ossidazione o ancora come building blocks per l'assemblaggio di sistemi supramolecolari. L'attuale progetto prevede inizialmente la sintesi e la caratterizzazione, con varie tecniche, tra cui elettrochimica, di complessi del Co con basi diSchiff ottenuti dalla condensazione di 3-acetil-tirosina con etilendiammina. Il legante ottenuto risulta di notevole interesse perché consente di inglobare ioni metallici, in questo caso ioni Co, in oligopeptidi. L'elettrochimica permette di determinare parametri termodinamici e cinetici legati ai trasferimenti elettronici Co(IV)/Co(III)/Co(II)/Co(I) e di correlarli a parametri strutturali.

### 2) ELETTRICITÀ DI CITOCROMI C ADSORBITI SU ELETTRODI DI AU MODIFICATI

Ricerca in collaborazione con il Prof. M.Borsari e Dott. A.Ranieri e C. Bortolotti, Dipartimento di Chimica, Università di Modena e Reggio Emilia e Dott. Silvia Peressini (borsista).

Si vuole studiare l'effetto della presenza di urea in elevata concentrazione sul processo di electron transfer nei citocromi c di bovino e di lievito e su alcuni loro mutanti, adoperando elettrodi di Au coperti con un monostrato misto di acido 11-mercapto-1-undecanoico e alcol 11-mercapto-1-undecanolo. Misure elettrochimiche preliminari, assieme a studi di surfaceenhancedresonanceRaman (SERR), indicano due distinti stati per le proteine adsorbite. Uno stato nativo, in cui il gruppo heme è coordinato assialmente dai leganti Met80 e His18, che mostra un potenziale di riduzione debolmente dipendente dalla concentrazione di urea e un secondo stato, che si osserva quando la conc. di urea > 6M, in cui il legante Met80 è sostituito da un residuo istidinico. Si studierà anche l'interazione di alcuni citocromi c con O<sub>2</sub> nei riguardi del quale sembrano essere dei promettenti attivatori di riduzione.

### 3) ESTRAZIONE DI METALLI DI RILEVANZA AMBIENTALE: CORRELAZIONE STRUTTURA PROPRIETÀ PER UN PROCESSO EFFICIENTE

Ricerca in collaborazione con la Prof. M.Tolazzi, Dott. A.Melchior, Dott. E. Peralta (Dottorando c/o Università di UD, ospite), Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche, Università di Udine.

Il progetto prevede lo sviluppo di nuovi processi che selettivamente rimuovano metalli pesanti di importanza ambientale da soluzioni acquose. Questo procederà attraverso la valutazione preliminare delle caratteristiche chimico-fisiche (struttura, stabilità) dei complessi formati da composti sequestranti con i metalli pesanti in solvente organico mediante tecniche sperimentali termodinamiche, elettrochimiche e metodi teorici. In seguito, verranno condotti test di separazione bifasica utilizzando le combinazioni di sistemi estraenti (legante, fase estraente, supporto) ritenuti più promettenti. Per questa tipologia di ricerca è attiva una collaborazione tra le due Università Regionali (Trieste, Udine) con il gruppo di separazione chimica dell'Università Autonoma di Barcellona (già attiva tramite un dottorato in co-tutela). Lo studio in atto porterà nuove competenze sulla preparazione di membrane liquide supportate mentre la collaborazione integra e migliora l'approccio scientifico.

PUBBLICAZIONI: 4

FINANZIAMENTI:

- Direzione Centrale Lavoro, Università e Ricerca su fondi Regione 2009 DPR 23.06.2009 n. 165/Pres "Estrazione di metalli di rilevanza ambientale: correlazione struttura proprietà per un processo efficiente" (decreto di concessione contributi n. 2614/LAVFOR/2009 del 21.12.2009). Totale al progetto 21,600 euro: totale al sottoscritto 4,500 euro.

## **Prof. Paolo Tecilla**

La ricerca sviluppata nell'ambito di questa tematica è concentrata sulle funzioni di sistemi supramolecolari e in particolare sullo sviluppo di catalizzatori idrolitici di esteri fosforici, sullo studio di ionofori artificiali e sulla realizzazione di sensori molecolari fluorescenti. Nel corso del 2010 l'attenzione è stata maggiormente focalizzata sulla sintesi e studio di ionofori artificiali sia a base peptidica che contenuti calixareni o altri sistemi macrociclici. In particolare con questa ultima classe di composti si è evidenziato un'interessante selettività nei confronti del trasporto di anioni.

PUBBLICAZIONI: 2

FINANZIAMENTI:

- FVG bando 2006, Progetto Regione, 80.000 Euro, anno di assegnazione: 2008, 1 anno.

**Prof. Dario Voinovich, dott. Beatrice Perissutti**

1) ATTIVAZIONE MECCANOCHIMICA DI FITODERIVATI CARATTERIZZAZIONE CHIMICO-FISICA E VALUTAZIONE BIOFARMACEUTICA IN VITRO E IN VIVO.

In questo progetto di ricerca il processo di attivazione meccanochimica in mulino planetario è stato applicato al fine di migliorare la biodisponibilità di principi attivi poco solubili. Sono stati perseguiti due obiettivi al fine di indurre modifiche nella sostanza attiva che ne facilitano la dissoluzione nei fluidi gastro-intestinali e quindi la rendono maggiormente biodisponibile: da un lato promuovere la formazione di uno stato solido "attivato" (solidi amorfi, nanocristallini, difetti cristallini), dall'altro indurre la trasformazione della sostanza attiva nel corrispondente sale solubile. Alla comacinazione fa seguito un'estesa caratterizzazione per valutare le caratteristiche delle polveri ottenute (tramite TEM, SEM, diffrattometria laser e porosimetria a mercurio, analisi BET), dello stato solido formato (tramite DSC, analisi della dimensione dei cristalliti sulla base dei dati calorimetrici, PXRD, DRIFT, Raman spectroscopy/imaging) e per verificare l'eventuale formazione del sale (tramite SS-NMR e XPS). Infine sui migliori campioni vengono condotte le indagini biofarmaceutiche (dissoluzione in vitro assorbimento in vivo dopo somministrazione orale).

2) PREPARAZIONE E CARATTERIZZAZIONE DI MICROEMULSIONI E SISTEMI AUTOEMULSIONANTI SOLIDI

Obiettivo generale del programma di ricerca è la preparazione di sistemi di rilascio solidi autoemulsionanti (SEDDS), che combini i vantaggi del sistema autoemulsionante e quelli di una forma solida, al fine di migliorare l'assorbimento sistemico di farmaci poco solubili e/o poco permeabili. In questa ricerca vengono prodotti pellets autoemulsionanti impiegando le tecnologie dell'estrusione/sferonizzazione, della granulazione in granulatore rapido e della coestrusione/sferonizzazione. Dapprima vengono messe a punto le formulazioni attraverso selezione delle variabili formulative e di processo. Quali principi attivi sono scelti p.a. fitoterapici, la cui biodisponibilità orale sia limitata da scarsa solubilità e/o permeabilità e il cui dosaggio sia compatibile alla veicolazione in un SEDDS. Alla preparazione fanno seguito studi di caratterizzazione tecnologica (ad es. contenuto di farmaco, analisi granulometrica, determinazione del diametro delle gocce, tempo di disaggregazione, DSC, XRD, ..) e dissolutiva in vitro nonché preliminari indagini in vivo su animali.

3) PRODUZIONE DI FORME FARMACEUTICHE SOLIDE A RILASCIO MODIFICATO CON LA TECNOLOGIA DELL'ESTRUSIONE E DELLA CO-ESTRUSIONE PER FUSIONE E RELATIVA VALUTAZIONE

L'estrusione per fusione è una tecnica di recente impiego in campo farmaceutico che ha dimostrato di essere applicabile a forme farmaceutiche a rilascio immediato e sostenuto. Durante il processo, la miscela di legante, eccipienti e p.a. sono processati nella camera riscaldata, vengono forzati a passare attraverso lo stampo di adatta forma inserito al termine della camera. Il polimero termoplastico, fuso o rammollito alla temperatura di esercizio, fonde da legante durante il processo e si solidifica rapidamente all'uscita dallo stampo stesso. Nella presente ricerca tale tecnologia è stata impiegata nella preparazione in estrusore a pistone di estrusi elicoidali a base di cera microcristallina contenenti un p.a. modello, che sono stati poi caratterizzati dal p.v. dello stato solido e delle caratteristiche morfologiche. I profili dissolutivi in vitro sono condotti in condizioni appositamente scelte per la f.f. in questione, sono stati studiati con un modelling ad hoc. Su campioni selezionati sono stati poi condotti gli studi in vivo su volontari sani dopo somministrazione orale in capsule di gelatina dura. Il transito g.i. della formulazione è stato monitorato tramite immagini radiografiche e infine sui dati plasmatici è stata effettuata adatta analisi farmacocinetica.

4) PREPARAZIONE, CARATTERIZZAZIONE E STUDI DI BIODISPONIBILITÀ IN VIVO DI MANGIMI MEDICATI PER ACQUACOLTURA.

Gli antibiotici sono ampiamente impiegati in acquacoltura per il trattamento delle infezioni batteriche divenute frequenti a causa dall'elevata densità di stoccaggio del pesce negli impianti di acquicoltura. L'abuso o l'uso di dosi inappropriate di antibiotici rappresenta una minaccia per la salute umana e la sicurezza ambientale. Quindi è necessario esaminare il comportamento degli antibiotici dopo la somministrazione, ed in particolare i meccanismi di degradazione di tali principi attivi, al fine di ottenere adeguati regimi di dosaggio. Formulazioni ad elevata biodisponibilità di tali antibiotici, che ne permettano auspicabilmente la somministrazione di una dose ridotta a parità di effetto terapeutico, sarebbero altamente gradite. Pertanto in questo studio sono state messe a punto e testate in vivo sia su pesci d'acqua dolce che salata numerose formulazioni innovative come autoemulsionanti, microemulsioni singole e multiple, caricate di antibiotici (ossitettraciclina ed eritromicina) che poi sono state caricate su mangimi per pesci, in modo da mimare la comune prassi di allevamento. I profili plasmatici e le immagini radiografiche di formulazioni analoghe radioopache nonché l'analisi farmacocinetica hanno permesso di studiare il comportamento di tali formulazioni dopo somministrazione orale.

5) DESIGN DI F.F. INNOVATIVE PER FITOTERAPICI

Il principale obiettivo di questo progetto di ricerca è proprio quello di promuovere la ricerca nel campo delle applicazioni della tecnologia farmaceutica per migliorare la "performance" terapeutica dei farmaci di origine vegetale, realizzando forme farmaceutiche innovative di solito destinate a composti attivi di sintesi. L'importanza di questo tema è dimostrata dal fatto che lo sviluppo di tecnologie innovative svolge un ruolo strategico in tutti i paesi industrializzati.

Numerosi medicinali fitoterapici di frequente impiego presentano infatti problemi di biodisponibilità e quindi di scarsa efficacia terapeutica; tra questi ricordiamo per esempio l'estratto di cardo mariano, gli alcaloidi della Vinca minor, l'Echinacea in considerazione del particolare interesse dimostrato nei loro confronti dalla comunità scientifica e dal mercato mondiale.

#### 6) CARATTERIZZAZIONE E PROGETTAZIONE DI MATRICI POLIMERICHE PER IL RILASCIO DI PRINCIPI ATTIVI BASATI SUGLI ACIDI NUCLEICI (NAPD)

Obiettivo della ricerca è quello di determinare alcune caratteristiche nanostrutturali delle matrici polimeriche oggetto del presente progetto mediante prove sperimentali e la costituzione di modelli matematici per l'interpretazione dei dati stessi. In particolare, si vuole stimare la dimensione media delle maglie polimeriche e la loro distribuzione dimensionale in quanto tali caratteristiche sono di fondamentale importanza ai fini del rilascio controllato di principi attivi quali, ad esempio, quelli basati sugli acidi nucleici (NABD). A tal fine risultano essenziali l'indagine reologica, diffusiva, NMR a basso campo e crioporosimetrica. Per la loro diffusione nel settore biomedico gli alginati (polisaccaridi naturali) ed i pluronici (copolimeri triblocco Polietilenoossido-Prolipropilenoossido-polietilenoossido) sono considerati tra i polimeri costituenti le matrici. Sulla base dei dati ottenuti negli esperimenti sopra riportati, verranno eseguiti prove di rilascio su modelli cellulari di sostanze con potenziale terapeutico.

PUBBLICAZIONI: 7

FINANZIAMENTI:

- Progetto "Vettori orali di vaccini per la piscicoltura del FVG" finanziato dalla Regione F.V.G : **35000 eur**
- Progetto "Miglioramento dei processi produttivi e di trasformazione di produzione biologiche di canapa e riso finanziato dalla Regione FVG (2009-2010): **12000 eur**
- Contratto con Farmaderbe s.r.l.: **13000 eur**

#### **Prof. Ennio Zangrando**

##### 1) COMPOSTI DI COORDINAZIONE CON PROPRIETÀ CATALITICHE E A STRUTTURA POLIMERICA CON PROPRIETÀ MAGNETICHE.

E' continuata la collaborazione tra il Laboratorio di Strutturistica e l' "Indian Association for the Cultivation of Science" (Calcutta, India) e l'Università di Calcutta sulla sintesi, la caratterizzazione, lo studio delle proprietà di complessi metallici quali materiali per possibili applicazioni nell'ambito delle nanotecnologie e della microelettronica. Questi composti sono costituiti da ioni metallici paramagnetici (e non) della serie di transizione coordinati da basi di Schiff, leganti organici polidentati neutri (es. biperidina, ammine) e anionici (es. ossalato, squarato).

PUBBLICAZIONI: 16

FINANZIAMENTI:

- PRIN 2007 Coordinatore: B. Milani

## ALLEGATO B

### PUBBLICAZIONI E BREVETTI 2010

#### Publicazioni

1. KT. Al-Jamal, F. M. Toma, A. Yilmazer, H. Ali-Boucetta, A. Nunes, M.-A. Herrero, B. Tian, A. Eddaoui, A.-J. W. T., A. Bianco, M. Prato, K. Kostarelos "Enhanced cellular internalization and gene silencing with a series of cationic dendron-multiwalled carbon nanotube:siRNA complexes" *Faseb Journal*, 24, 4354-4365 (2010).
2. F. Asaro, A. Benedetti, I. Freris, P. Riello, N. Savko, "Evolution of the Nonionic Inverse Microemulsion-Acid-TEOS System during the Synthesis of Nanosized Silica via the Sol-Gel Process" *Langmuir*, 26, 12917-12925 (2010).
3. G. Balducci "The adsorption of glucose at the surface of anatase: A computational study." *Chem. Phys. Lett.*, 2010, 494, 54-59.
4. A. Banerjee, P. Maiti, T. Chattopadhyay, K.S. Banu, M. Ghosh, E. Suresh, E. Zangrando & D. "Das Syntheses and crystal structures of cadmium(II) $X_2$ -hexamethylenetetramine ( $X=Br^-/I^-/SCN^-$ ) coordination polymers having different dimensionality" *Polyhedron*, 29, 951-958, 2010
5. W. Baratta, F. Benedetti, A. Del Zotto, L. Fanfoni, F. Felluga, S. Magnolia, E. Putignano, P. Rigo "Chiral Pincer Ruthenium and Osmium Complexes for the Fast and Efficient Hydrogen Transfer Reaction of Ketones." *Organometallics* 2010, 29, 3563-3570.
6. D. Barreca, P. Fornasiero, A. Gasparotto, V. Gombac, C. Maccato, A. Pozza and E. Tondello, "CVD Co3O4 nanopyrramids: a nano-platform for the photo-assisted H2 production.", *Chemical Vapor Deposition* 16 (2010), 296-300,.
7. J. Bartmess, B. Ballesteros, G. de la Torre, D. Kiessling, S. Campidelli, M. Prato, T. Torres, D. M. Guldi "Phthalocyanine-Pyrene Conjugates: A Powerful Approach toward Carbon Nanotube Solar Cells" *J. Am. Chem. Soc.*, 132, 16202-16211 (2010).
8. A Basso, P Spizzo, V Ferrario, L Knapic, N Savko, P Braiuca P, C Ebert, E Ricca, V Calabrò, L Gardossi, "Endo- and Exo-inulinases: Enzyme- substrate interaction and rational immobilization", *Biotechnol Prog* 2010, 29, 397-405.
9. M. Benincasa, S. Pacor, W. Wu, A. Bianco, M. Prato, R. Gennaro "Antifungal activity of Amphotericin B conjugated to carbon nanotubes" *ACS Nano*, 5, 199-208 (2010).
10. C. Bonini, L. Chiumiento, M. De Bonis, N. Di Blasio, M. Funicello, P. Lupattelli, R. Pandolfo, F. Tramutola, F. Berti; "Synthesis of New Thienyl Ring Containing HIV-1 Protease Inhibitors: Promising Preliminary Pharmacological Evaluation against Recombinant HIV-1 Proteases" 2010 *Journal Of Medicinal Chemistry*. Vol.53. pp.1451-1457.
11. I. Bratsos, E. Alessio "Ruthenium(II)-chlorido complexes of dimethylsulfoxide" *Inorg. Synth.*, 2010, 35, 148-152.
12. C. Capici, De Zorzi, R., Gargiulli, C. Gattuso, G., Geremia, S., Notti, A., Pappalardo, S., Parisi, M. F., Puntoriero, F. "Calix[5]crown-3-based heteroditopic receptors for n-butylammonium halides" *Tetrahedron*, 2010, 66, 27, 4987-94
13. M. Cargnello, N. L. Wieder, T. Montini, R. J. Gorte and P. Fornasiero, "Synthesis of dispersible Pd@CeO2 nanostructures by self-assembly.", *J. Am. Chem. Soc.* 132 (2010), 1402-1409,
14. M. Cargnello, T. Montini, S. Polizzi, N. L. Wieder, R. J. Gorte, M. Graziani and P. Fornasiero, "Novel embedded Pd@CeO2 catalysts: a way to active and stable catalysts.", *Dalton Trans.* 39 (2010), 2122-2127,.
15. M. Cargnello, C. Gentilini, T. Montini, E. Fonda, S. Mehraeen, M. Chi, M. Herrera-Collado, N. D. Browning, L. Pasquato, P. Fornasiero "Active and stable embedded Au@CeO2 catalysts for preferential oxidation of CO." *Chem. Mater.* 2010, 22, 4335-4345.
16. R. Carion, V. Liégeois, B. Champagne, \*D. Bonifazi, S. Pelloni and P. Lazzaretti "Discussion on the Aromatic Character of 1,2-Dihydro-1,2-azaborine According to Magnetic Criteria" *J. Phys. Lett.*, 2010, 10, 1563-1568..
17. Francesca Cateni, Marina Zacchigna, PEG anticancer-drugs. In: *Macromolecular Anticancer Therapeutics*". Ed. Springer (Reddy, L. Harivardhan, Couvreur, Patrick Eds.) 2010, 221-264. ISBN: 978-1-4419-0506-2.
18. Francesca Cateni, Jelena Zilic, Marina Zacchigna, Giuseppe Procida, "Cerebrosides with antiproliferative activity from *Euphorbia peplis L.*" *Fitoterapia* 81 (2010) 97-103. doi:10.1016/j.fitote.2009.08.022.
19. Francesca Cateni, Vittorio Lucchini, Marko Anderluh, Paolo Martinuzzi, Marina Zacchigna, Andrej Piltaver, Bojan Doljak, "Triterpenes from *Gloephyllum Odoratum* as Potential Leads Towards Potent Thrombin Inhibitors" *Letters in Drug Design & Discovery* 7 (2010) 7, 521-527.
20. Cellot, L. Ballerini, M. Prato, A. Bianco "Neurons Are Able to Internalize Soluble Carbon Nanotubes: New

- Opportunities or Old Risks?" *Small*, 6, 2630-2633 (2010).
21. K. Chakrabarty, C. Forzato, P. Nitti, G. Pitacco and E. Valentin "The first kinetic enzymatic resolution of methyl ester of C75" *Letters in Organic Chemistry* 7, 245-248, **2010**
  22. T. Chattopadhyay, M. Mukherjee, A. Mondal, P. Maiti, A. Banerjee, K.S. Banu, S. Bhattacharya, B. Roy, D.J. Chattopadhyay, T.K. Mondal, M. Nethaji, E. Zangrando & D. "Das A Unique Nickel System having Versatile Catalytic Activity of Biological Significance" *Inorg. Chem.*, 49, 3121-3129, 2010
  23. Siew Lee Cheong, Anna Dolzhenko, Silvia Paoletta, Stephanie Federico, Barbara Cacciari, Anton Dolzhenko, Sonja Kachler, Karl-Norbert Klotz, Stefano Moro, Giampiero Spalluto and Giorgia Pastorin. "The Significance of 2-Furyl Ring Substitution with a 2-(para-substituted) Aryl Group in a New Series of Pyrazolo-triazolo-pyrimidines as Potent and Highly Selective hA<sub>3</sub> Adenosine Receptors Antagonists: New Insights into Structure-Affinity Relationship and Receptor-Antagonist Recognition" *Journal of Medicinal Chemistry* , **2010**, 53 (8), 3361-3375.
  24. Cinzia Coppola, Antonio Paciello, Gaetano Mangiapia, Sabina Licen, Mariangela Boccalon, Lorenzo De Napoli, Luigi Paduano, Paolo Tecilla, and Daniela Montesarchio. "Design, Synthesis and Characterisation of a Fluorescently Labelled CyPLOS Ionophore" *Chem. Eur. J.***2010**, 16, 13757 - 13772.
  25. S. Coriani, T. Kjaergaard, P. Jørgensen, K. Ruud, J. Huh, R. Berger "An Atomic-Orbital-Based Lagrangian Approach for Calculating Geometric Gradients of Linear Response Properties" *J. Chem. Theory Comput.* 6 1028-1047 (2010).
  26. C. Crotti, E. Farnetti, N. Guidolin, "Alternative intermediates for glycerol valorization: iridium-catalyzed formation of acetals and ketals", *Green Chem.*, 2010, 12, 2225-2231.
  27. C. Crotti, J. Kašpar and E. Farnetti, "Dehydrogenation of glycerol to dihydroxyacetone catalyzed by iridium complexes with P-N ligands." *Green Chemistry* 12 (2010) 1295.
  28. Favier, D. Picurelli, C. Pradel, J. Durand, B. Milani, M. Gomez "Stabilization of Pd, Pt and Ru nanoparticles by optically active CO/styrene copolymers" *Inorg. Chem. Commun.*, 2010, 13, 766-768.
  29. A. D'Amora, L. Fanfoni, D. Cozzula, N. Guidolin, E. Zangrando, F. Felluga, S. Gladiali, F. Benedetti, B. Milani "Addressing the poly- to oligo-ketone selectivity in styrene carbonylation catalyzed by Pd/bpy complexes. Effect of the 6-alkyl substitution" *Organometallics*, 2010, 29, 4472-4485.
  30. A. D'Amora, L. Fanfoni, D. Cozzula, N. Guidolin, E. Zangrando, F. Felluga, S. Gladiali, F. Benedetti, B. Milani "Addressing the Poly- to Oligo-ketone Selectivity in Styrene Carbonylation Catalyzed by Palladium/bpy Complexes. Effect of the 6-Alkyl Substitution" *Organometallics* 29, 4472-4485, **2010**.
  31. S. Dalai, A. Rana, D.S. Chowdhuri, M. Bera & E. Zangrando "Cubane-like water clusters in a 3D supramolecular network of zinc with pyridine-2,6-dicarboxylic acid and 5-aminotetrazole" *Inorg. Chim. Acta*, 363, 1052-1055, 2010
  32. S. Dalai, A. Rana, M. Bera, D.S. Chowdhuri & E. Zangrando "3D non porous and thermally labile nickel(II) and manganese(II) complexes with hetero donor ligands: Synthesis, X-ray single crystal structure, thermal and luminescent study" *Inorg. Chim. Acta*, 363, 1843-1848, 2010
  33. S. Dalai, M. Bera, A. Rana, D.S. Chowdhuri & E. Zangrando "Combination of covalent and hydrogen bonding in the formation of 3D uranyl-carboxylate networks" *Inorg. Chim. Acta*, 363, 3407-3412, 2010
  34. S. Dalai, D.S. Chowdhuri, M. Bera, A. Rana, N. Guidolin & E. Zangrando "Synthesis, structure and luminescence study of two cadmium(II) coordination polymers with hetero donor ligands: Expansion of network dimensionality from 2D to 3D through hydrogen bonding" *Inorg. Chim. Acta*, 363, 3700-3705, 2010
  35. L. De Rogatis, M. Cargnello, V. Gombac, B. Lorenzuti, T. Montini and P. Fornasiero, "Embedded phases: a way to active and stable catalysts.", *ChemSusChem* 3 (2010), 24-42
  36. N. De Zordi, K. Kikic, I. Moneghini, M. Solinas, D. "Piroxicam solid state studies after processing with SAS technique". *J. Supercritical Fluids*, **2010** vol. 55 (11); p. 340-347. ISSN: 0896-8446
  37. R. De Zorzi, N. Guidolin, L. Randaccio, S. Geremia "Bifunctionalized porous material containing discrete assemblies of copper-porphyrins and calixarenes metallated by ion diffusion" *CrystEngComm*, 2010, 12, 4056-4058
  38. S. Dey, S. Sarkar, H. Paul, E. Zangrando & P. Chattopadhyay "Copper(II) complex with tridentate N donor ligand: Synthesis, crystal structure, reactivity and DNA binding study" *Polyhedron*, 29, 1583-1587, 2010
  39. R. Dreos, S. Geremia, S. Randaccio, L. Siega, P. "Properties, Structure and Reactivity of Cobaloximes" *PATAI's Chemistry of Functional Groups* John Wiley & Sons, Ltd 2010
  40. R. Dreos, L. Randaccio, P. Siega, C. Tavagnacco & E. Zangrando "Guest driven self-assembly of a rectangular box from methylaquacobaloxime and 4,4'-biphenyldiboronic acid" *Inorg. Chim. Acta*, 363, 2113-2124, 2010
  41. D. Ćija, \* K. Seufert, D. Heim, W. Auwärter, \* C. Aurisicchio, C. Fabbro, D. Bonifazi\* and J. V. Barth "Hierarchic Self-Assembly of Nanoporous Chiral Networks with Conformationally Flexible Porphyrins" *ACS Nano*, **2010**, 4936-4942.

42. Magnus Eriksson, Antoine Boyer, Loris Sinigoi, Mats Johansson, Eva Malmstrom, Karl Hult, Mats Martienlle, "One-Pot enzymatic route to tetraallyl ether functional oligoesters: synthesis, UV curing and characterization", *Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry*, 2010, 48(23), pp 5289-5297.
43. E. Farnetti, S. Filipuzzi, "Directing iridium-catalyzed C-C bond formation by selection of the ancillary ligands: polymerization and cyclotrimerization of alkynes", *Inorg. Chim. Acta*, 2010, 363, 467-473.
44. F. Felluga, C. Forzato, P. Nitti, G. Pitacco, E. Valentin, E. Zangrando "Application of 1,3-azomethine ylides derived from  $\alpha$ -dicarbonyl compounds and L-proline to the synthesis of pyrrolizidines " *J. Heterocyclic Chem.* 47, 664-670, **2010**
45. F.Felluga, F.Ghelfi, G. Pitacco, F. Roncaglia, E. Valentin C.D.Venneri "Esterase-mediated synthesis of optically active GABA analogues containing a stereogenic all-carbon quaternary carbon atom" *Tetrahedron: Asymmetry* 21, 2183-2191, **2010**
46. E. Franceschinis, Bortoletto C., Perissutti B., Dal Zotto M., Voinovich D., Realdon N. (2011) Self-emulsifying pellets in a lab-scale high shear mixer: Formulation and production design *Powder Technology*. 207 (1-3), pp. 113-118.
47. C. Gentilini, L. Pasquato, "Morphology of Mixed-Monolayers Protecting Metal Nanoparticles". *J. Mater. Chem.* 2010, 20, 1403-1412.
48. T. Gianferrara, A. Bergamo, I. Bratsos, B. Milani, C. Spagnul, G. Sava, E. Alessio "Ruthenium-porphyrin conjugates with cytotoxic and phototoxic antitumor activity" *J. Med. Chem.*, 2010, 53, 4678-4690.
49. V. Gombac, L. Sordelli, T. Montini, J. J. Delgado, A. Adamski, G. Adami, M. Cargnello, S. Bernal and P. Fornasiero, "CuOx-TiO2 Photocatalysts for H2 Production from Ethanol and Glycerol Solutions.", *J. Phys. Chem. A* 114 (2010), 3916-3925,.
50. G. Grassi, Hasa D., Voinovich D., Perissutti B., Dapas B., Farra R., Franceschinis E., Grassi M. Simultaneous release and ADME processes of poorly water soluble drugs: mathematical modelling *Molecular Pharmaceutics* Vol. 7, (5) 1488-1497, 2010
51. M. Grzelczak, N. Kulisic, M. Prato, A. Mateo-Alonso "Multimode assembly of phenanthroline nanowires decorated with gold nanoparticles" *Chem. Commun.*, 46, 9122-9124 (2010).
52. P. Halder, E. Zangrando & T.K. Paine "Copper(II)  $\alpha$ -hydroxycarboxylate complexes of bis(2-pyridylcarbonyl)amine ligand: From mononuclear complex to one-dimensional coordination polymer" *Polyhedron*, 29, 434-440, 2010
53. D. Hasa, Voinovich D., Perissutti B., Bonifacio A., Grassi M., Franceschinis E., Dall'acqua S., Speh M., Plavec J., Invernizzi S. Multidisciplinary approach on characterizing a Mechanochemically activated composite of Vinpocetine and Crospovidone *Journal Of Pharmaceutical Sciences* Vol. 100, (3), 915-932, 2011
54. D. Hasa, Voinovich D., Perissutti B., Grassi M., Bonifacio A., Sergio V., Cepek C., Chierotti M.R., Gobetto R., Dall'acqua S., Invernizzi S. Enhanced Oral Bioavailability of Vinpocetine Through Mechanochemical Salt Formation: Physico-Chemical Characterization and In Vivo Studies *Pharmaceutical Research* DOI: 10.1007/s11095-011-0415-8
55. D. Heim, K. Seufert, W. Auwärter,\* C. Aurisicchio, C. Fabbro, D. Bonifazi\* and J. V. Barth "Surface-assisted Assembly of Discrete Porphyrin-based Cyclic" *Supramolecules. Nano Lett.*, **2010**, 10, 122-127.
56. D. Heim, D. Ćija,\* K. Seufert, W. Auwärter,\* C. Aurisicchio, C. Fabbro, D. Bonifazi\* and J. V. Barth "Flexible Coordination Polymers on Metallic Surfaces" *J. Am. Chem. Soc.*, **2010**, 132, 6783-6790..
57. MA. Herrero, J. Guerra, V. S. Myers, M. V. Gomez, R. M. Crooks, M. Prato "Gold Dendrimer Encapsulated Nanoparticles as Labeling Agents for Multiwalled Carbon Nanotubes" *ACS Nano*, 4, 905-912 (2010).
58. N. Hickey, I. Boscarato, J. Kašpar, L. Bertinetti, M. Botavina, G. Martra, "Effect of the support on activity of silver catalysts for the selective reduction of NO by propene", *Applied. Catal. B Environ.* 100 (2010) 102.
59. MT. Indelli, C. Chiorboli, F. Scandola, E. Iengo, P. Osswald, F. Wurthner "Photoinduced Processes in Self-Assembled Porphyrin/Perylene Bisimide Metallosupramolecular Boxes" *J. Phys. Chem. B*, 2010, 114, 14495-14504.
60. T. Iosio, Voinovich D., Perissutti B., Serdoz F., Hasa D., Grabnar I., Dall'acqua S., Zara G.P., Muntoni E., Pinto J.F Oral bioavailability of silymarin phytocomplex formulated as self-emulsifying pellets *Phytomedicine* DOI: 10.1016/j.phymed.2010.10.012
61. S. Karmakar, O. Das, S. Ghosh, E. Zangrando, M. Johann, E. Rentschler, T. Weyhermüller, S. Khanra & T.K. "Paine Hexanuclear copper(II) cage with {Cu<sub>3</sub>O...H...OCu<sub>3</sub>} core supported by a dicompartmental oxime ligand with *m*-xylyl spacer: synthesis, molecular structure and magnetic studies" *Dalton Trans.*, 39, 10920-10927, 2010
62. I. Kikic, De Zordi N., Moneghini M., Solinas D. (2010) Solubility estimation of drugs in ternary systems of interest for the antisolvent precipitation processes. *J. Supercritical Fluids*, vol. 55 (2); p. 616-622. ISSN: 0896-8446

63. K. Kivimaki, J. Alvarez Ruiz, M. Coreno, M. Stankiewicz, G. Fronzoni, M. Stener and P. Decleva "S 2p photoabsorption of the SF<sub>5</sub>CF<sub>3</sub> molecule: experiment, theory and comparison with SF<sub>6</sub>" *Chem. Phys.*, 375 101 - 109 (2010).
64. S. Korica, A. Reinkoster, M. Braune, J. Viehhaus, D. Rolles, B. Langer, G. Fronzoni, D. Toffoli, M. Stener, P. Decleva, O. M. Al-Dossary and U. Becker. "Partial photoionization cross sections of C<sub>60</sub> and C<sub>70</sub>: a gas versus adsorbed phase comparison" *Surface Science*, 604 1940 - 1944 (2010).
65. K. Kostarelos, A. Bianco, M. Prato "Complement monitoring of carbon nanotubes. Authors' Reply" *Nature Nanotechnology*, 5, 382-383 (2010).
66. E. Laurini, D. Zampieri, M.G. Mamolo, L. Vio, C. Zanette, C. Florio, P. Posocco, M. Fermeglia, S. Pricl "3D-pharmacophore model for  $\alpha_2$  receptors based on a series of substituted benzo[d]oxazol-2(3H)-one derivatives." *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 20 (2010) 2954-2957
67. B. Lorenzut, T. Montini, C. C. Pavel, M. Comotti, F. Vizza, C. Bianchini and P. Fornasiero, "Embedded Ru@ZrO<sub>2</sub> catalysts for H<sub>2</sub> production by ammonia decomposition.", *ChemCatChem* 2 (2010), 1096-1106.
68. M. Lucarini, L. Pasquato, "ESR spectroscopy as a tool to investigate the properties of self-assembled monolayers protecting metal nanoparticles". *Nanoscale*, 2010, 2, 668-676.
69. F. Maffei, Betti P, Genovese D, Montalti M, Prodi L, De Zorzi R, Geremia S, Dalcanale E. "Highly Selective Chemical Vapor Sensing by Molecular Recognition: Specific Detection of C(1) -C(4) Alcohols with a Fluorescent Phosphonate Cavitand" *Angew Chem Int Ed Engl.* 2011. doi: 10.1002/anie.201100738.
70. G. Magro, G. Giannini, S. Geremia, M. Severgnini, P. Siega, G. Tromba, C. Vidali, R. Vidimari "Potenzialità in terapie oncologiche mediante cattura neutronica (NCT) di bioconiugati per vitamina B<sub>12</sub> con isotopi di gadolinio" *Radiazioni Ricerca e Applicazioni*, 2010, 13, 7-11
71. A. Mancin, P. Tecilla and U. Tonellato, "Optical Signalling with Silica Nanoparticles" in "The Supramolecular Chemistry of Organic-Inorganic Hybrid Materials", R. Martinez-Manez and K. Rurack Eds., Wiley, 2010, pp. 351-376.
72. R. Marega, V. Aroulmoji, M. Bergamin, L. Feruglio, F. Dinon, A. Bianco, E. Murano, M. Prato "Two Dimensional Diffusion-Ordered NMR Spectroscopy as a Tool for Monitoring Functionalized Carbon Nanotube Purification and Composition" *ACS Nano*, 4, 2051-2058 (2010).
73. A. Mateo-Alonso, N. Kulisic, G. Valenti, M. Marcaccio, Francesco, Paolucci, M. Prato "Facile synthesis of highly stable tetraazaheptacene and tetrazaaoctacene dyes" *Chem. Asian J.*, 5, 482-485 (2010).
74. A. Mateo-Alonso, M. Prato "Synthesis of fullerene-stoppered rotaxanes bearing ferrocene groups on the macrocycle" *Eur. J. Org. Chem.*, 1324-1332 (2010).
75. A. Mateo-Alonso, M. Grzelczak, M. Prato "Multimode assembly of phenanthroline nanowires decorated with gold nanoparticles" *Chem. Commun.*, 46, 9122 - 9124 (2010).
76. A. Ménard-Moyon, K. Kostarelos, M. Prato, A. Bianco "Functionalized Carbon Nanotubes for Probing and Modulating Molecular Functions" *Chemistry & Biology*, 17, 107-115 (2010).
77. C. Ménard-Moyon, E. Venturelli, C. Fabbro, C. Samorì, T. Da Ros, K. Kostarelos, M. Prato, A. Bianco "The alluring potential of functionalized carbon nanotubes in drug discovery" *Exp. Opin. Drug Discov.*, 5, 691-707 (2010).
78. L. Milic, M. Prato "Fullerene Unsymmetrical Bis-Adducts as Models for Novel Peptidomimetics" *Eur. J. Org. Chem.*, 476-483 (2010).
79. S. Mohnani and D. Bonifazi "Supramolecular Architectures of Porphyrins on Surfaces: the Structural Evolution from 1D to 2D to 3D to Devices" \* *Coord. Chem. Rev.*, 2010, 254, 2342-2362.
80. S. Mohnani, A. Llanes-Pallas and D. Bonifazi\* "Mastering Nanostructured Materials Through H-bonding Recognitions at Interfaces" *Pure Appl. Chem.*, 2010, 10, 917-929.
81. S. Monari, D. Millo, A. Ranieri, G. Di Rocco, G. van der Zwan, S. Peressini, C. Tavagnacco, P. Hildebrandt, M. Borsari. "The Impact of Urea-Induced Unfolding on the Redox Process of Immobilised Cytochrome c" (JBIC-10-04-00065) *J. Biol. Inorg. Chem.* (2010), 15(8), 1233-1242.
82. M. Moneghini, De Zordi N., Solinas D., Macchiavelli S., Princivale F. (2010). Characterization of solid dispersions of itraconazole and vitamin E TPGS prepared by microwave technology. *Future Medicinal Chemistry*, vol. 2 (2); p. 237-246. ISSN: 1756-8919.
83. D. Montagner, A. Venzo, E. Zangrando & B. Longato "Irreversible Insertion of Benzonitrile into Platinum(II)-Nitrogen Bonds of Nucleobase Complexes. Synthesis and Structural Characterisation of Stable Azametallacycle Compounds" *Inorg. Chem.*, 49, 2103-2110, 2010
84. T. Montini, R. Singh, P. Das, B. Lorenzut, N. Bertero, P. Riello, A. Benedetti, G. Giambastiani, C. Bianchini, S. Zinoviev, S. Miertus and P. Fornasiero, "Renewable H<sub>2</sub> from glycerol steam reforming: effect of La<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and CeO<sub>2</sub> addition to Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalysts.", *ChemSusChem* 3 (2010), 619-628.
85. T. Montini, V. Gombac, A. Hameed, L. Felisari, G. Adami and P. Fornasiero, "Synthesis, characterization and photocatalytic performance of transition metal tungstates.", *Chemical Physics Letters* 498 (2010), 113-119.

86. J. Niziol, M. Prato, C. Soombar, E. Vazquez, E. Gondek, I. Rau, F. Kajzar "Photoluminescence and Electro-Optic Kerr Effect in Porphyrin Derivatives of C60" *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 522, 491-502 (2010).
87. P. O'Keeffe, P. Bolognesi, A. Mihelic, A. Moise, R. Richter, G. Cautero, L. Stebel, and R. Sergio, L. Pratica, E. Ovcharenko, P. Decleva, L. Avaldi "Photoelectron Angular Distributions from Polarized Ne Atoms near Threshold" *Phys. Rev. A*, 82 052522 (2010).
88. FM. Olajuyigbe, N. Dimitri, J. O. Ajele, E. Maurizio, L.Randaccio, S.Geremia "Carbamylation of N-Terminal Proline Revealed High-Resolution X-ray Diffraction and Mass Spectrometry on Single Crystals" *ACS Med. Chem. Lett.*, 2010, 1, 254-257.
89. T. Osipov, M. Stener, A. Belkacem, M. Scöffler, Th. Weber, L. Schmidt, A. Landers, M. H. Prior, R. Dörner and C. L. Cocke "Carbon K-shell photoionization of fixed-in-space C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>" *Phys. Rev. A*, 81 033429 (1-12) (2010).
90. Silvia Paoletta, Stephanie Federico, Giampiero Spalluto and Stefano Moro. Chapter 13: Receptor-Driven Identification of Novel Human A<sub>3</sub> Adenosine Receptor Antagonists as Potential Therapeutic Agents. *Methods in Enzymology. Constitutive Activity in receptors and other proteins*, **2010**, Part B, 485, 225-244.
91. Giorgia Pastorin, Stephanie Federico, Silvia Paoletta, Marta Corradino, Francesca Cateni, Barbara Cacciari, Karl-Norbert Klotz, Zhan-Guo Gao, Kenneth A. Jacobson, Giampiero Spalluto, Stefano Moro. "Synthesis and pharmacological characterization of a new series of 5,7-disubstituted-[1,2,4]triazolo[1,5-a][1,3,5]triazine derivatives as adenosine receptor antagonists: A preliminary inspection of ligand–receptor recognition process". *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 18, **2010**, 2524-2536.
92. P. Pengo, L. Pasquato "Modified gold nanoparticles and surfaces", in "Supramolecular chemistry of organic-inorganic-hybrid material"; K. Rurack, R. Martinez-Manez Eds. Wiley, New York, 2010.
93. S. Petretti, Y.V. Vanne, A. Saenz, A. Castro and P. Decleva "Alignment-Dependent Ionization of N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, and CO<sub>2</sub> in Intense Laser Fields" *Phys. Rev. Letters* 104, 223001 (2010)
94. G. Pitacco; O. A. Attanasi; L. De Crescentini ; G. Favi ; F. Felluga ; C. Forzato; F. Mantellini; P. Nitti ; E. Valentin ; E. Zangrando "Organocatalyzed synthesis of chiral non-racemic 1,4-dihydropyridazines" *Tetrahedron: Asymmetry* 21, 617-622, **2010**
95. M. Prato "Controlled nanotube reactions" *Nature*, 465, 172-173 (2010).
96. M. Prato, C. Soombar, E. Vazquez, J. Niziol, E. Gondek, I. Rau, F. Kajzar "Synthesis and Spectroscopic Properties of Porphyrin Derivatives of C60" *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 521, 253-264 (2010).
97. L. Preti, O.A. Attanasi, E. Caselli, G.Favi, C. Ori, P.Davoli, F. Felluga, F. Prati ".One-Pot Synthesis of Imidazole-4-Carboxylates by Microwave-Assisted 1,5-Electrocyclization of Azavinyl Azomethine Ylides" *Eur.J.Org.Chem* 4312-4320, **2010**
98. S. Pricl, Tonelli M, Boido V, La Colla P, Loddo R, Ibba C, Giliberti G, Laurini E, Posocco P, Fermeglia M "Synergistic experimental/computational studies on arylazoamine derivatives that target the bovine viral diarrhoea virus RNA-dependent RNA polymerase" *Bioorg Med Chem.* 18 (2010) 6055-68.
99. M. Quintana, K. Spyrou, M. Grzelczak, W. R. Browne, P. Rudolf, M. Prato " Functionalization of Graphene via 1,3-Dipolar Cycloaddition" *ACS Nano*, 4, 3527-3533 (2010).
100. M. Quintana, X. Ke, G. V. Tendeloo, M. Meneghetti, C. Bittencourt, M. Prato "Light-Induced Selective Deposition of Au Nanoparticles on Single Wall Carbon Nanotubes" *ACS Nano*, 4, 6105–6113 (2010).
101. M. Quintana, M. Grzelczak, M. Prato "Organic functionalization of carbon nanostructures via 1,3-dipolar cycloadditions" *Phys. Status Solidi B*, 247, 2645–2648 (2010).
102. L. Randaccio, Geremia S, Demitri N, Wuerges J. "Vitamin B12: unique metalorganic compounds and the most complex vitamins" *Molecules*. 2010;15(5):3228-59.
103. Valentina Rapozzi, Marina Zacchigna, Stefania Biffi, Chiara Garrovo, Francesca Cateni, Marco Stebel, Sonia Zorzet, GianMaria Bonora, Sara Drioli, Luigi E. Xodo, "Conjugated PDT drug Photosensitizing activity and tissue distribution of PEGylated pheophorbide a" *Cancer Biology & Therapy* (2010) 10:5, 1-12. DOI:10.4161/cbt.10.5.12536, Codice rivista: E184064, Issn: 1538-4047
104. D. Rossi, M. Urbano, A. Pedrali, M. Serra, D. Zampieri, M.G. Mamolo, C. Laggner, C. Zanette, C. Florio, D. Schepmann, B. Wuensch, O. Azzolina, S. Collina "Design, synthesis and SAR analysis of novel selective  $\sigma_1$  ligands (Part 2)" *Bioorg. Med. Chem.* 18 (2010) 1204-1212.
105. N. Rubio, M. A. Herrero, A. d. I. Hoz, M. Meneghetti, M. Prato, E. Vázquez " Versatile microwave-induced reactions for the multiple functionalization of carbon nanotubes" *Org. Biomol. Chem.*, 8, 1936-1942 (2010).
106. L. Samori, H. Ali-Boucetta, R. Sainz, C. Guo, F. M. Toma, C. Fabbro, T. Da Ros, M. Prato, K. Kostarelos, A. Bianco "Enhanced anticancer activity of multi-walled carbon nanotube–methotrexate conjugates using cleavable linkers" *Chem. Commun.*, 46, 1494–1496 (2010).
107. C. Samori, R. Sainz, C. Ménard-Moyon, F. M. Toma, E. Venturelli, P. Singh, M. Ballestri, M. Prato, A. Bianco " Potentiometric titration as a straightforward method to assess the number of functional groups on shortened carbon nanotubes " *Carbon*, 48, 2447-2454 (2010).
108. S. Sarkar, T. Mukherjee, E. Zangrando & P. Chattopadhyay "Copper(II) complex of *in situ* formed 5-(2-pyridyl)-

- 1,3,4-triazole through C-S bond cleavage in 1,2-bis(2-pyridylmethylthio)-bis-ethylsulphide: Synthesis, structural characterization and DNA binding study" *J. Mol. Struct.*, 980, 117-123, 2010
109. S. Sarkar, S. Dey, T. Mukherjee, E. Zangrando, M.G.B. Drew & P. Chattopadhyay "Coordination behavior of pyridylmethylthioether system with cupric chloride and cupric bromide: C-S bond cleavage and crystal structures" *J. Mol. Struct.*, 980, 94-100, 2010
  110. S. Sarkar, S. Sen, S. Dey, E. Zangrando & P. Chattopadhyay "Coordination behavior of 3,4-bis(2-pyridylmethylthio)toluene with copper(II) ions: Synthesis, structural characterization and reactivity, and DNA binding study of the dinuclear copper(II) complex" *Polyhedron*, 29, 3157-3163, 2010
  111. J. Schiessling, A. Grigoriev, M. Stener, L. Kjeldgaard, T. Balasubramanian, P. Decleva, R. Ahuja, J. Nordgren and P. A. Bruhwiler "The role of charge-charge correlations and covalent bonding in the electronic structure of adsorbed C<sub>60</sub>: C<sub>60</sub>/Al" *J. Phys. Chem. C*, 114 18686 - 18692 (2010).
  112. F. Serdoz, Voinovich D., Perissutti B., Grabnar I., Hasa D., Ballestrazzi R. An innovative oxytetracycline self-emulsifying formulation for fish diets: preparation, characterisation and oral bioavailability in Rainbow Trout (*Oncorhynchus mykiss*) and in European Sea Bass (*Dicentrarchus Labrax*) *Journal Of Drug Delivery Science And Technology*. Vol. 20, ( 6), 431-437, 2010
  113. Giampiero Spalluto, Stephanie Federico, Barbara Cacciari, Alberto Bianco, Siew Lee Cheong and Maurizio Prato. Biomedical Applications I: Delivery of Drugs. Chapter 2 in *Carbon Nanotubes: from Bench Chemistry to Promising Biomedical Applications*. Eds: Pastorin Giorgia. Pan Stanford Publishing Pte Ltd. 15 October 2010.
  114. S. Specchia, L. D. Vella, B. Lorenzuti, T. Montini, V. Specchia and P. Fornasiero, "Effect of the catalyst load on syngas production in SCT-CPO reactors.", *Ind. Eng. Chem. Res.* 49 (2010), 1010-1017.
  115. S. Specchia, L. D. Vella, L. De Rogatis, T. Montini, V. Specchia and P. Fornasiero, "Rh-based Catalysts for Syngas Production via SCT-CPO Reactors.", *Catalysis Today* 155 (2010), 101-107,.
  116. F. Tancini, Yebeutchou RM, Pirondini L, De Zorzi R, Geremia S, Scherman OA, Dalcanale E. "Host-guest-driven copolymerization of tetraphosphonate cavitands" *Chemistry*. 2010;16(48):14313-21.
  117. M. Teale, S. Coriani, and T. Helgaker "Accurate calculation and modeling of the adiabatic connection in density functional theory". *J. Chem. Phys.* 132, 164115 (2010)
  118. M. Teale, S. Coriani, and T. Helgaker "Range-dependent adiabatic connections" *J. Chem. Phys.* 133, 164112 (2010).
  119. D. Toffoli and P. Decleva "Strong Oscillations in the nondipole corrections to the photoelectron angular distributions from C<sub>60</sub>" *Phys. Rev. A* 81 061201 (2010)
  120. M. Toma, A. Sartorel, M. Iurlo, M. Carraro, P. Parris, C. M. S. Rapino, B. R. Gonzalez, H. Amenitsch, T. Da Ros, L. Casalis, A. Goldoni, M. Marcaccio, G. Scorrano, G. Scoles, F. Paolucci, M. Prato, M. Bonchio "Efficient Water Oxidation at Carbon Nanotube/Polyoxometalate Electrocatalytic Interfaces" *Nature Chemistry*, 2, 826-831 (2010).
  121. J. Van den Bossche, W. T. Al-Jamal, B. Tian, A. Nunes, C. Fabbro, A. Bianco, M. Prato, K. Kostarelos "Efficient receptor-independent intracellular translocation of aptamers mediated by conjugation to carbon nanotubes" *Chem. Commun.*, 46, 7379-7381 (2010).
  122. E. Vázquez, M. Prato "Functionalization of carbon nanotubes for applications in materials science and nanomedicine" *Pure Appl. Chem.*, 82, 853-861 (2010).
  123. E. Vesselli, M. Rizzi, L. De Rogatis, X. Ding, A. Baraldi, G. Comelli, L. Savio, L. Vattuone, M. Rocca, P. Fornasiero, A. Baldereschi and M. Peressi, "Hydrogen-assisted transformation of CO<sub>2</sub> on nickel: the role of formate and carbon monoxide.", *J. Phys. Chem. Lett.* 1 (2010), 402-406,
  124. V. Vrdoljak, B. Prugovečki, D. Matković-Čalogović, R. Dreos, P. Siega, C. Tavagnacco Zigzag Chain, "Square Tetranuclear, and Polyoxometalate-Based Inorganic-Organic Hybrid Compounds - Molybdenum vs Tungsten", *Crystal Growth & Design* (2010), 10(3), 1373-1382.
  125. Masakazu Yamazaki, Jun-ichi Adachi, Yasuyuki Kimura, Mauro Stener, Piero Decleva and Akira Yagishita "N 1s photoelectron angular distributions from fixed-in-space NO<sub>2</sub> molecules: Stereodynamics and symmetry considerations" *J. Chem. Phys.* 133 164301 1-9 (2010).
  126. M. Youssry, F. Asaro, L. Coppola, L. Gentile, I. Nicotera, "Solution microstructures of the micellar phase of Pluronic L64/SDS/water system" *J. Colloid Interface Sci.* 342, 348-353 (2010).
  127. S. Zinoviev, F. Muller-Langer, P. Das, N. Bertero, P. Fornasiero, M. Kaltschmitt, G. Centi and S. Miertus, "Next generation biofuels: survey of emerging technologies and sustainability issues.", *ChemSusChem* 3 (2010), 1106-1133, cover article.
  128. De-Eknamku W., Umehara K., Monthakantirat O., Toth R., Frececr V., Knapic L., Braiuca P., Miertus S., "QSAR Study of Natural Estrogen-Like Isoflavonoids and Diphenolics from Thai Medicinal Plants", *J. of Mol. Graph. and Mod.* - accettato per la pubblicazione

129. Gardossi L., Halling P.J., "Guidelines for reporting of biocatalytic reactions", Proceedings of the 4<sup>th</sup> International Symposium on Experimental Standard Conditions Of Enzyme Characterizations, Hicks M.G., Kettner C. Eds., Logos Verlag Berlin, 2010, 187-204.
130. Ricca E., Calabrò V., Curcio S., Iorio G., Gardossi L., Basso A., Fructose production by inulinase covalently immobilized on Sepabeads in batch and fluidized bed bioreactor, 2010, Int. J. Mol. Sci., 11, 1180-1189.
131. Gardossi L., Poulsen P.B., Ballesteros A., Hult K., Vytas K., Švedas V.K., Vasić-Rački D., Carrea G., Magnusson A., Schmid A., Wohlgemuth R., J. Halling P.J., "Guidelines for reporting of biocatalytic reactions", *Trends in Biotechnology*, 2010, 28, 171-180
132. A. Astel, S. Cozzutto, F. Cozzi, G. Adami, P. Barbieri, S. Tsakovski, V. Simeonov (2010) "Seasonal Apportionment of the Sources of Ambient Air Particulates in the City of Trieste." International Journal of Environment and Pollution. Vol. 41, No.1/2, 70–89.
133. Federico Cozzi, Gianpiero Adami, Pierluigi Barbieri, Edoardo Reisenhofer, Pietro Apostoli, Massimo Bovenzi "Toxic elements content in PM10 samples from a coastal area of the Northern Adriatic Sea" Central European Journal of Chemistry
134. Pierluigi Barbieri, Sergio Cozzutto "La combustione e le sorgenti antropiche" in Gianluigi de Gennaro e Stefania Petraccone (a cura di), "Particelle in atmosfera. Conosciamole meglio" (2010), Ed. Villaggio Globale (ISBN 88-901654-3-X)

## Brevetti

1. Gianpiero Adami (Università degli Studi di Trieste), "Paint stripping composition and device for application thereof for paint stripping by peel-off", brevetto internazionale n° WO/2010/122515 (22/04/2010).
2. Diana Fattor, Lucia Gardossi, Loris Sinigoi, Patrizia Spizzo, "Metodo per l'immobilizzazione covalente di enzimi su supporti polimerici solidi funzionalizzati" Italian Patent Pending: PD2010A000392, 2010.

## ALLEGATO C

### Partecipazioni a Congressi e seminari per invito.

#### Conferenze plenarie

1. P. Fornasiero, "Tailoring Nanostructured Catalysts in a Hydrogen Economy" **SAMIC2010**, Bressanone, Italia, Dicembre 2010
2. Silvano Geremia, "*Structural basis for vitamin B12 delivery and the rational design of bioconjugates*" The 5th Central European Conference – Chemistry towards Biology 8–11 September 2010, Primošten, Croatia

#### Comunicazioni Orali

1. Gianpiero Adami, Matteo Crosera, Edoardo Reisenhofer, Andrea Gorassini, Alessandro Giacomello, "La misura del pH della carta: stato dell'arte e recenti approcci analitici", XXII Convegno nazionale della Divisione di Chimica Analitica (SCI), Como 12-16 settembre 2010, relazione orale CARCBC1.
2. Paolo Braiuca, L. Knapic, L. Gardossi, "Optimization strategies in enzyme engineering", International modeFrontier Users' Meeting 2010, Trieste, Italy, 27-28 May 2010
3. P. Canton, A. Benedetti, T. Montini, A. Hameed, V. Gombac and P. Fornasiero, "Structural characterization and photocatalytic activity correlation of  $\text{Bi}_2\text{O}_3/\text{Bi}_2\text{O}_{4-x}$  Nanocomposite", CF2010 – XXXIX Congresso Nazionale di Chimica Fisica, Stresa (VB), settembre 2010
4. C. Crotti, E. Farnetti, "A novel glycerol valorization route: iridium-catalyzed chemoselective dehydrogenation", IX Congresso del Gruppo Interdivisionale di Chimica Organometallica, June 2010, Firenze
5. V. Dal Santo, A. Gallo, M. Marelli, R. Psaro, V. Gombac, T. Montini, P. Fornasiero, "A new class of catalysts for  $\text{H}_2$  production by renewables photoreforming." NANOSMAT, Reims, Francia, ottobre 2010
6. P. Decleva "An independent particle TDSE model for strong field molecular ionization." COST ACTION CM0702, 1<sup>st</sup> Meeting of the WG2 Università di Trieste, 22-24 April 2010
7. C. Ebert, P. Braiuca, L. Gardossi, V. Ferrario, "Computational tools as an aid for the full exploitation of lipases' catalytic potential" 2 - 4 Sept. 2010, COFEM 2010 Giornate di Chimica Organica Fisica e Meccanicistica, Roma (Italy),
8. Valerio Ferrario: Reaction promiscuity, amidase activity Restricted IRENE meeting, Stockholm, 28 September 2010
9. Valerio Ferrario: Reaction promiscuity, amidase activity Restricted IRENE meeting, Copenhagen, 29 September 2010
10. Valerio Ferrario: "Sviluppo di nuovi metodi computazionali per la simulazione di proteine" I giovani e la chimica in Friuli Venezia Giulia, UDINE, ITALY, September 24 2010
11. Valerio Ferrario: "DDOS – Drug Discovery and Optimization by Simulation" ESTECO Meeting, Trieste, ITALY, October 13 2010
12. V. Gombac, T. Montini, L. Sordelli, M. Cargnello and P. Fornasiero, "CuO<sub>x</sub>/TiO<sub>2</sub> nanostructure for photocatalytic hydrogen production", ACS Fall 2010 National Meeting, Boston, USA, agosto 2010
13. E. Iengo "Modular approach towards multi-chromophore assemblies" XXIIIrd IUPAC Symposium on Photochemistry, Ferrara, Italy, 11-16 July 2010
14. Lorena Knapic "Overview of computational methods for studying enzyme structure and selectivity" National Taiwan University, Taipei, Taiwan, 8 July 2010,
15. Lorena Knapic "ModeFrontier as a tool for enzyme engineering" Esteco Meeting, Trieste, Italy, 13 October 2010,
16. Grassi M., Voinovich D., Perissutti B., Grassi G., Correlazione vitro-vivo e modelli matematici. 50° Simposio AFI. Rimini, Giugno 2010
17. Foscatto Marco "New molecular descriptors for correlating enantioselectivity and entropic contributions" Restricted meeting IRENE: Stockholm, 28.09.2010, WP5 Task 5.2 D 5.12
18. Foscatto Marco Reaction promiscuity, amidase activity Restricted IRENE meeting, Stockholm, 28 September 2010
19. T. Montini, N. Bertero, B. Lorenzut, P. Canton, P. Riello, A. Benedetti, G. Giambastiani, C. Bianchini and P. Fornasiero, "Optimization of Pt-based catalysts for glycerol reforming", XVI National Congress of Catalysis - GIC 2010, Palermo, settembre 2010

20. C. Spagnul, T. Gianferrara, A. Bergamo, I. Bratsos, B. Milani, G. Sava, E. Alessio (2010). Ruthenium-porphyrin conjugate with cytotoxic and phototoxic antitumor activity. EspPhotobiology School, 21-26 June, 2010, Bressanone, Italy.
21. C. Spagnul, T. Gianferrara, I. Bratsos, E. Alessio (2009). Synthesis and structural characterization of meso-tetra(bpy)-porphyrins peripherally conjugated to water-soluble ruthenium fragments for bio-medical applications. 10th International Symposium On Applied Bioinorganic Chemistry, 25-28 September 2009, Debrecen, Hungary.
22. C. Spagnul, T. Gianferrara, I. Bratsos, E. Zangrando, E. Alessio (2010). Synthesis and evaluation of new ruthenium-porphyrin conjugates as  $^1\text{O}_2$  generators for Photodynamic Therapy. Esp Photobiology School, 21-26 June, 2010, Bressanone, Italy.
23. M. Stener "Resonances in chiral photoemission from a transition metal compound" COST ACTION CM0702, 1<sup>st</sup> Meeting of the WG2 Universita' di Trieste, 22-24 April 2010
24. -Sergio Cozzutto, Sabina Licen, Pierluigi Barbieri "Analisi di composti target e ritrovamenti imprevisti con DTD-GC-MS su filtri di particolato atmosferico: messa a punto di metodiche analitiche e casi di studio" XII Congresso Nazionale di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali, Taormina, 26-30 settembre 2010.
25. -Sergio Cozzutto, Sabina Licen, Pierluigi Barbieri "Approccio integrato al problema delle molestie olfattive provenienti da impianti di stoccaggio di idrocarburi" XII Congresso Nazionale di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali, Taormina, 26-30 settembre 2010.
26. -Pierluigi Barbieri "Il problema delle molestie olfattive" Workshop ARPA Puglia: L'impatto odorigeno - Stato dell'arte e possibili sviluppi tecnico-scientifici e normativi - Taranto 7 maggio 2010
27. -Sergio Cozzutto, Armando Miliazza, Gianluigi De Gennaro, Antonio Cesare Imperatore, Pierluigi Barbieri "Automatizzazione della DTD-GC-MS per l'analisi di IPA nel PM10 e nel PM2.5: risultati e esperienze in un'area costiera complessa", 4° Congresso nazionale sul Particolato Atmosferico PM2010, Venezia 18-20 maggio 2010.

## Comunicazioni Poster

1. Gianpiero Adami, Matteo Crosera, Edoardo Reisenhofer, Andrea Gorassini, Alessandro Giacomello, "Spettroscopia ATR-FTIR per lo studio dei nastri adesivi ai fini della loro rimozione da supporti cartacei", XXII Convegno nazionale della Divisione di Chimica Analitica (SCI), Como 12-16 settembre 2010, poster 39.
2. D. Barreca, P. Fornasiero, A. Gasparotto, V. Gombac, O.I. Lebedev, C. Maccato, E. Tondello, G. Van Tendeloo "Tailoring the formation of cobalt oxide nanomaterials: from the synthesis to the photocatalytic  $\text{H}_2$  production", , 2010 Materials Research Society Fall Meeting, Boston, USA, 29 Novembre-3 Dicembre 2010
3. D. Barreca, P. Fornasiero, A. Gasparotto, V. Gombac, O.I. Lebedev, C. Maccato, T. Montini, G. Van Tendeloo, E. Tondello, S. Turner, "Tailored synthesis of copper- and cobalt-oxide nanosystems for photocatalytic  $\text{H}_2$  production" Seventh International Conference on Inorganic Materials, Biarritz, France, Settembre 2010.
4. S. Bidoggia, L. Pasquato, "Morphology of mixed-monolayers protecting gold nanoparticles". Summer Workshop on Supramolecular Functional Materials, Bibione (VE) 20-22/05/2010.
5. M. Bogataj, Ružič B., Perissutti B., Voinovich D., Mrhar A. Release of Theophylline from Sustained Release Cylindrical Dosage Forms. In: 8<sup>th</sup> Central European Symposium on Pharmaceutical Technology and Biodelivery Systems, Graz, Austria, Settembre 2010
6. I. Bratsos, E. Mitri, C. Simonin, E. Zangrando, E. Alessio "Development of new half sandwich Ru coordination compounds as potential antitumor agents" XXXVIII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Inorganica della SCI Trieste, 13 – 16 September 2010
7. G. Calogera', Passerini N., Albertini B., Hasa D., Voinovich D. Melt Granulation in fluidized bed: Screening of the process variables by factorial design. In: 8<sup>th</sup> Central European Symposium on Pharmaceutical Technology and Biodelivery Systems, Graz, Settembre 2010
8. P. Canton, A. Benedetti, T. Montini, A. Hameed, V. Gombac and P. Fornasiero, "Structural characterization and photocatalytic activity correlation of  $\text{Bi}_2\text{O}_3/\text{Bi}_2\text{O}_{4-x}$  Nanocomposite", NANOTECHITALY2010, Venezia, ottobre 2010
9. M. Cargnello, P. Fornasiero, V. Gombac, M. Graziani, B. Lorenzutti and T. Montini, "Embedded metal nanoparticles as heterogeneous catalysts: advantages and disadvantages", XXXVIII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Inorganica della Società Chimica Italiana, Trieste, settembre 2010 (poster, T. Montini, M. Cargnello).
10. Francesca Cateni, Marina Zacchigna, Mauro Mazzei, Mannino, S., Mazzei, M.T. Sara Drioli, Pedemonte, N., Galiotta, L.J.V. "4-(Furan-2'-yl)-1,4-dihydropyridine derivatives potentiate the CFTR chloride channel" XX National meeting on Medicinal Chemistry, 12-16 settembre 2010, Abano Terme Padova.
11. D. Catone, S. Turchini, T. Prosperi, N. Zema, G. Contini, V. Feyer, M. Beccari, K. C. Prince, M. Stener, P. Decleva "Gas phase circular dichroism in the photoelectron spectroscopy of dissymmetric metal-organic complex: Co(III)-tris-(acetylacetonate)." XVIII Meeting of the Italian Society for Synchrotron Radiation (SILS 2010), 24-26 June 2010, Padova, Italy
12. D. Catone, S. Turchini, T. Prosperi, N. Zema, G. Contini, V. Feyer, M. Beccari, K. C. Prince, M. Stener, P. Decleva "gas phase circular dichroism in the photoelectron spectroscopy of asymmetric metal-organic complex: Co(III)-tris-

- (acetylacetonate)." 10<sup>th</sup> European Conference on Atom, Molecules and Photons (ECAMP 10), Salamanca, Spain, July 4-9, 2010
13. Matteo Crosera, Francesca FilonLarese, Massimo Bovenzi, Edoardo Reisenhofer, Gianpiero Adami, "Assorbimento cutaneo in vitro di nanoparticelle di nichel", XXII Convegno nazionale della Divisione di Chimica Analitica (SCI), Como 12-16 settembre 2010, poster 62.
  14. C. Crotti, N. Guidolin, E. Farnetti, "Alternative intermediates for glycerolvalorization: iridium-catalyzed formation of acetals and ketals", XXXVIII Congresso di Chimica Inorganica, September 2010, Trieste
  15. P. Declava, S. Petretti, Y. Vanne, A. Saenz, A. Castro "Angular dependence of Strong Field ionization. A full single electron approach" 10<sup>th</sup> European Conference on Atom, Molecules and Photons (ECAMP 10), Salamanca, Spain, July 4-9, 2010.
  16. Sara Drioli, Fabio Benedetti, Marina Zacchigna, Luigi Xodo, Gian Maria Bonora, "Synthesis and application of new mixed, polymer-conjugated drugs. Use of selectively end-modified poly(ethylene glycol)" 14<sup>th</sup> International Biotechnology Symposium and Exhibition, 14-18 settembre 2010, Rimini.
  17. L. Fanfoni, A. Meduri, E. Zangrando, S. Castillon, F. Felluga, B. Milani "New hybrid P-N ligands: coordination chemistry to palladium and catalytic activity in alkene dimerization" International School on polymer synthesis and characterization ISOPSC – 2010 Fisciano (Italy) June 27 – July 2, 2010.
  18. L. Fanfoni, A. Meduri, E. Zangrando, S. Castillon, F. Felluga, B. Milani "New hybrid P-N ligands: coordination chemistry to palladium and catalytic activity in alkene dimerization" XXXVIII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Inorganica della SCI Trieste, 13 – 16 September 2010.
  19. L. Fanfoni, F. Benedetti, F. Felluga "Efficient Chemoenzymatic synthesis of chiral HCNNPincer ligands" *Convegno Nazionale del Chimica Organica*, San Benedetto del Tronto, 12-14 settembre 2010, P40, PF9.
  20. Diana Fattor, Harumi Veny, Patrizia Spizzo, Lucia Gardossi "Rational development of immobilization methods: analysis of lipase structure and polymer interactions" 31 January - 5 February 2010, Bressanone (Bz), Italy
  21. Diana Fattor, Harumi Veny, Patrizia Spizzo, Valerio Ferrario, Paolo Braiuca and Lucia Gardossi "Production of biodiesel catalyzed by immobilized lipases highly stable under operative conditions" *Novel Enzymes 2010* 14-17 April 2010, Exeter, United Kingdom
  22. V Ferrario, P Braiuca, L Gardossi, L Knapic, C Ebert, "Integration of multivariate statistics and molecular modelling for the development of quantitative models of enzyme selectivity and stability", *Gordon Research Conference-Biocatalysis 2010*, Smithfield, RI, USA, July 11-16, 2010.
  23. V. Ferrario, P. Braiuca, L. Gardossi, L. Knapic, C. Ebert, "Integration of multivariate statistics and molecular modeling for the development of quantitative models of enzymes selectivity and stability", *Gordon Research Conference – Biocatalysis 2010*, Smithfield, RI, USA, 11-16 July 2010
  24. V. Ferrario<sup>a</sup>, C. Ebert<sup>a</sup>, P. Braiuca<sup>b</sup>, L. Knapic<sup>a</sup>, L. Gardossi<sup>a</sup> *Computational tools for the full exploitation of catalytic potential of biocatalysts* 14<sup>th</sup> International Biotechnology Symposium and Exhibition, *Biotechnology for the Sustainability of Human Society* 14-18 September 2010, Palacongressi, Rimini –
  25. P Halling, A Schmid, B Buhler, L Gardossi, V Ferrario, "Standards are boring... But better data reporting would substantially increase the value of work in biocatalysis", *Gordon Research Conference-Biocatalysis 2010*, Smithfield, RI, USA, July 11-16, 2010.
  26. D. Hasa, Voinovich D., Perissutti B., Bonifacio A., Grassi M, Franceschinis E., Dall'acqua S., Speh M., J. Plavec. "Multidisciplinary approach on characterizing composites of vinpocetine and crospovidone obtained by solid state activation". In: 8<sup>th</sup> Central European Symposium on Pharmaceutical Technology and Biodelivery Systems, Graz, Austria, Settembre 2010
  27. E. Iengo, A. Brugnara, E. Zangrando, E. Alessio "Pyridylporphyrin metallacycles- effect of the metal" XXXVIII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Inorganica della SCI Trieste, 13 – 16 September 2010.
  28. E. Iengo, T. Gatti, E. Zangrando, E. Alessio "Metal-mediated multiporphyrin assemblies that behave like nanometric step-machines." 5<sup>th</sup> International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry, Nara (Japan) 6 – 10 June 2010.
  29. C. Kivimaki, L. Avaldi, P. Bolognesi, M. Coreno, P. O'Keeffe, V. Feyer, J. Alvarez Ruiz, M. Stankiewicz, M. Stener, G. Fronzoni, P. Declava "Photoabsorption, photoionization and photoelectron - Auger electron coincidence studies of the SF<sub>6</sub> molecule at and above the S 2p edge" 37<sup>th</sup> International Conference on Vacuum Ultraviolet and X-ray Physics (VUVX2010), University of British Columbia, Vancouver, BC, Canada, 11-16 July 2010
  30. E. Laurini, Zampieri, D., Mamolo, M.G., Vio, L. – Posocco, P., Fermeglia, M., Pricl, S. – Zanette, C., Florio, C. "Synthesis, molecular modeling and experimental activity of some new acetamide, benzamide and phenylmethanone derivatives as sigma ligands." *XX National Meeting on Medicinal Chemistry, September 12-16 2010 Abano Terme (PD)*
  31. S. Monari, D. Millo, A. Ranieri, G. Di Rocco, G. van der Zwan, C. Gooijer, S. Peressini, C. Tavagnacco, P. Hildebrandt and M. Borsari "The Impact of Urea-Induced Unfolding on the Redox Process of Immobilised Cytochrome c" *Giornate dell'Elettrochimica Italiana, GEI ERA 2010, Modena, 5-10 settembre 2010.*
  32. P. O'Keeffe, P. Bolognesi, R. Richter, A. Moise, L. Pravica, E. Ovcharenko, P. Declava, A. Mihelic', L. Avaldi "Photoelectron Imaging in Pump-probe Experiments Combining Synchrotron and Laser Radiation" 10<sup>th</sup> European Conference on Atom, Molecules and Photons (ECAMP 10), Salamanca, Spain, July 4-9, 2010
  33. A. Ostric, F. Benedetti, F. Berti "A Ring Closing Metathesis Strategy Towards Mono- and Dihydroxyethylene sesters of Xaa-Pro Dipeptides" *Convegno Nazionale del Chimica Organica*, San Benedetto del Tronto, 12-14 settembre 2010, P1.
  34. A. Ostric: "HIV Protease Inhibitors Based on Monohydroxyethylene sesters of Proline" *I giovani e la chimica in Friuli Venezia Giulia 2010*, Udine, 24 sett. 2010,
  35. A. Ostric: "New Synthetic Strategy Towards Mono- and Dihydroxyethylene sesters of Xaa-Pro peptides" *SAYCS*, Pesaro, 18-20 ott. 2010

36. V. Pace, C. Lunghi, B. Richichi, C. Nativi, L. Pasquato "Synthesis and functionalization of water-soluble gold nanoparticles" 2010 Winter school of Physical Organic Chemistry
37. Michela Pavan, Lucia Lassiani, Antonio Varnavas "Anthranilic Acid Based CCK<sub>1</sub> Receptor Antagonists" XX National Meeting on Medicinal Chemistry, 12-16 settembre 2010, Abano Terme, Padova
38. E. Peralta Salvador, A. Melchior, C. Tavagnacco, M. Tolazzi "Mercury(II) complex formation with thioethers in aprotic medium". International Symposium on Metal Complexes ISMEC2010, Bilbao, 7-11 giugno 2010.
39. E. Plesiat, S.E. Canton, P. Decleva, F. Martin "Theoretical Study of the Vibrationally resolved Photoionization Cross Section for the Valence Shells of N<sub>2</sub> and CO" 10<sup>th</sup> European Conference on Atom, Molecules and Photons (ECAMP 10), Salamanca, Spain, July 4-9, 2010
40. E. Plesiat, P. Decleva, F. Martin "Theoretical Study of the Vibrationally resolved Photoionization Cross Section for the Inner Shells of N<sub>2</sub> and CO" 10<sup>th</sup> European Conference on Atom, Molecules and Photons (ECAMP 10), Salamanca, Spain, July 4-9, 2010
41. C. Da Porto, D. Decorti, D. Voinovich, F. Tubaro, "Characteristics of hemp (Cannabis sativa L.) seed oil extracted with supercritical CO<sub>2</sub>". 12<sup>th</sup> European meeting on supercritical fluids, Graz, Austria, 9-12 May 2010.
42. Valentina Rapozzi, Marina Zacchigna, Stefania Biffi, Chiara Garrovo, Francesca Cateni, Marco Stebel, Sonia Zorzet, Gian Maria Bonora, Sara Drioli and Luigi E. Xodo, "Conjugated PDT drug Photosensitizing activity and tissue distribution of PEGylated pheophorbide a". XX National meeting on Medicinal Chemistry, 12-16 settembre 2010, Abano Terme, Padova.
43. D. Ret, V. Khlebnikov, M. Albrecht, B. Milani Pd-carbene complexes as catalysts for alkene dimerization: preliminary investigation COST D40 Annual Meeting, Ankara (Turchia) 25 – 27 May 2010.
44. S. Saenz, S. Petretti, A. Castro, P. Decleva "Water Molecules in Ultrashort Intense Laser Pulses" 10<sup>th</sup> European Conference on Atom, Molecules and Photons (ECAMP 10), Salamanca, Spain, July 4-9, 2010
45. P. Siega, R. Dreos, C. Tavagnacco and V. Vrdoljak "Synthesis, Characterization and Electrochemical Behaviour of Co(II) and Co(III) Complexes with Salen-type Ligand." XXXVIII congresso nazionale della divisione di chimica inorganica, Trieste, 13 - 16 settembre 2010.
46. L. Sinigoj, D. Fattor, A. Basso, P. Spizzo, P. Braiuca e L. Gardossi, "Immobilizing lipases for industrial applications: synthesis of biodiesel and polyesters", "Novel Enzymes 2010", Exeter, United Kingdom, 14-17 April 2010.
47. L. Sinigoj, A. Basso, D. Fattor, V. Ferrario, P. Braiuca e L. Gardossi, "Immobilised lipases for biodiesel and polyester synthesis: optimization of biocatalyst stability under operational conditions", "RRB6 – the 6th International Conference on Renewable Resources and Biorefineries", Dusseldorf, Germany, 7-9 June 2010.
48. L. Sinigoj, L. Gardossi, P. Caimi, A. Basso, "Rigid, hydrophilic, macroporous, methacrylate functionalized Synbeads polymers for efficient industrial SPPS", "31st European Peptide Symposium", Copenhagen, Denmark, 5-9 September 2010.
49. L. Sinigoj, D. Fattor, A. Basso, P. Spizzo, P. Braiuca e L. Gardossi "Immobilizing lipases for industrial applications: synthesis of biodiesel and polyesters", RRB6 – the 6th International Conference on Renewable Resources and Biorefineries 7-9 June 2010, Dusseldorf, Germany
50. L. Sinigoj, A. Basso, D. Fattor, V. Ferrario, P. Braiuca e L. Gardossi "Immobilised lipases for biodiesel and polyester synthesis: optimization of biocatalyst stability under operational conditions". RRB6 – the 6th International Conference on Renewable Resources and Biorefineries 7-9 June 2010, Dusseldorf, Germany
51. C. Tavagnacco, S. Peressini, P. Siega, R. Dreos, V. Vrdoljak "Synthesis and electrochemical studies of Co(II) and Co(III) complexes with salen derivatives" *Giornate dell'Elettrochimica Italiana, GEI ERA 2010, Modena, 5-10 settembre 2010.*
52. I. UZUN., ALESSI P., KIKIC I., DE ZORDI N., MONEGHINI M., SOLINAS D., DINÇER S., SIPAHIGIL O. Effect of the Process Mode on the Properties of the Drug-Polymer Composite Particles Prepared by SAS Process. Nancy: Institute Nationale Polytechnique de Lorraine, (2010). pp.375- 380, In: 12th European Meeting on Supercritical Fluids. Graz, 9-12/05/2010, 978-2905267-72-6.
53. D. Voinovich, Serdoz F., Perissutti B., Hasa D., Pinto J., Zara G. P., Bargoni A. And Grabnar I. Gastro-intestinal lymphatic absorption of Sylibum Marianum formulated in self-emulsifying pellets. In: 8<sup>th</sup> Central European Symposium on Pharmaceutical Technology and Biodelivery Systems, Graz, Austria, Settembre 2010.
54. D. Voinovich, Grabnar I., Perissutti B., Calogera G., Passerini N. And Grassi M. Helicoidal waxy matrices as sustained drug delivery systems obtained by melt extrusion. World Meeting on Pharmaceutics, Biopharmaceutics and Pharmaceutical Technology, Malta, Marzo 2010
55. N. DE ZORDI, MONEGHINI M., KIKIC I., SOLINAS D. Supercritical Antisolvent Precipitation of Piroxicam Systems: Preliminary Experiments. Nancy: Institute Nationale Polytechnique de Lorraine, (2010). pp.257- 264, In: 12th European Meeting on Supercritical Fluids. Graz, 9-12/05/2010, 978-2905267-72-6.
56. I. Kaspar "Support effects on the activity of silver catalysts for the selective reduction of NO by propene", XXVII Congresso Nazionale di Chimica Inorganica, Trieste, Settembre 2010.
57. I. Kaspar "Support effects on the activity of silver catalysts for the selective reduction of NO by propene" Congresso del Gruppo Interdivisionale di Catalisi, Palermo, Settembre 2010.
58. C. Forzato, P. Nitti, G. Pitacco, E. Valentin "Kinetic Enzymatic Resolution of Alkyl tetrahydro-4-methylene-2-alkyl-5-oxo-3-furancarboxylates" XXXIII Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Organica della Società Chimica Italiana, San Benedetto del Tronto (AP), 12-16 Settembre 2010.
59. F. Felluga, G. Pitacco, E. Valentin, C. D. Venneri "Chemoenzymatic synthesis of optically active GABA analogues containing a stereogenic all-carbon quaternary carbon atom" XXXIII Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Organica della Società Chimica Italiana, San Benedetto del Tronto (AP), 12-16 Settembre 2010

60. A. Ostric, F. Benedetti, F. Berti "A Ring Closing Metathesis Strategy Towards Mono- and Dihydroxyethylene isosters of Xaa-Pro Dipeptides" *Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Organica della SCI, San Benedetto del Tronto, 12-14 settembre 2010, P1.*
61. L. Fanfoni, F. Benedetti, F. Felluga "Efficient Chemoenzymatic synthesis of chiral HCNN pincer ligands" *Convegno Nazionale della Divisione di Chimica Organica della SCI, San Benedetto del Tronto, 12-14 settembre 2010, P40, PF9.*
62. A. Ostric "HIV Protease Inhibitors Based on Monohydroxyethylene isosters of Proline" *I giovani e la chimica in Friuli Venezia Giulia 2010, Udine, 24 sett. 2010*
63. A. Ostric "New Synthetic Strategy Towards Mono- and Dihydroxyethylene isosters of Xaa-Pro peptides" *SAYCS, Pesaro, 18-20 ott. 2010*
64. Siew Lee Cheong, Anna Dolzhenko, Silvia Paoletta, Stephanie Federico, Barbara Cacciari, Anton Dolzhenko, Sonja Kachler, Karl-Norbert Klotz, Stefano Moro, Giampiero Spalluto, and Giorgia Pastorin. *The Significance of 2-Furyl Ring Substitution with a 2-(para-Substituted) Aryl Group in a New Series of Pyrazolo-Triazolo-Pyrimidines as Potent and Highly Selective hA<sub>3</sub> Adenosine Receptors Antagonists.* Nuove prospettive in chimica farmaceutica IV, 05-07 Maggio 2010, Santa Margherita di Pula (CA).
65. Giorgia Pastorin, Stephanie Federico, Francesca Cateni, Barbara Cacciari, Karl Norbert Klotz, Zhan-Guo Gao, Kenneth A. Jacobson, Marta Corradino, Silvia Paoletta, Stefano Moro and Giampiero Spalluto. *Synthesis and Pharmacological Characterization of a New Series of 5,7-Disubstituted-[1,2,4]Triazolo[1,5-a][1,3,5] Triazine Derivatives as Adenosine Receptor Antagonists: A Preliminary Receptor-Driven SAR Profile.* Nuove prospettive in chimica farmaceutica IV, 05-07 Maggio 2010, Santa Margherita di Pula (CA).
66. Silvia Paoletta, Stephanie Federico, Siew Lee Cheong, Anna Dolzhenko, Anton Dolzhenko, Sonja Kachler, Barbara Cacciari, Karl-Norbert Klotz, Giorgia Pastorin, Giampiero Spalluto and Stefano Moro. *The Pyrazolo-Triazolo-Pyrimidine Scaffold as a Versatile Platform to Design Potent and Highly Selective hA<sub>3</sub> Adenosine Receptor Antagonists: the Role of 2-Furyl Ring Substitution Demystified through Analysis on a Novel Series of 2-(para-Substituted)aryl Analogs.* Nuove prospettive in chimica farmaceutica IV, 05-07 Maggio 2010, Santa Margherita di Pula (CA).
67. Siew Lee Cheong, Anna Dolzhenko, Silvia Paoletta, Stephanie Federico, Barbara Cacciari, Anton Dolzhenko, Sonja Kachler, Karl-Norbert Klotz, Stefano Moro, Giampiero Spalluto, and Giorgia Pastorin. *The Significance of 2-Furyl Ring Substitution with a 2-(para-substituted) Aryl Group in a New Series of Pyrazolo-Triazolo-Pyrimidines as Potent and Highly Selective hA<sub>3</sub> Adenosine Receptors Antagonists.* XX National Meeting on Medicinal Chemistry 2010, 12-16 Settembre 2010, Abano Terme (PD).
68. Stephanie Federico, Siew Lee Cheong, Giorgia Pastorin, Barbara Cacciari, Karl Norbert Klotz, Kenneth A. Jacobson, ZanGuo Gao, Silvia Paoletta, Stefano Moro and Giampiero Spalluto. *Synthesis and Pharmacological Characterization of a New Series of [1,2,4]Triazolo[1,5-a][1,3,5]Triazines as Adenosine Receptor Antagonists: Investigations Around 5 Position.* XX National Meeting on Medicinal Chemistry 2010, 12-16 Settembre 2010, Abano Terme (PD).
69. Stephanie Federico, Silvia Paoletta, Siew Lee Cheong, Giorgia Pastorin, Barbara Cacciari, Karl-Norbert Klotz, Stefano Moro, and Giampiero Spalluto. Structural investigations on a novel class of 1,2,4-triazolo[1,5-c]pyrimidines as adenosine receptor antagonists. Nuove prospettive in chimica farmaceutica V, 28-30 Marzo 2011, Trieste (TS).
70. Stephanie Federico, Silvia Paoletta, Siew Lee Cheong, Giorgia Pastorin, Barbara Cacciari, Stefano Stragliotto, Karl-Norbert Klotz, Jeffrey Siegel, Zhan-Guo Gao, Kenneth A. Jacobson, Stefano Moro, and Giampiero Spalluto. 1,2,4-Triazolo[1,5-a]-1,3,5-triazine nucleus: a possible template for adenosine receptor subtypes. Nuove prospettive in chimica farmaceutica V, 28-30 Marzo 2011, Trieste (TS).
71. Pierluigi Barbieri, Federico Cozzi, Angelo Riccio, Raffaele Montella, Giuseppe Agrillo, Edoardo Busetto, Marco Peloi, Roberto Pugliese "Il progetto MADBAG per l'implementazione nella e-infrastruttura DORII della catena modellistica WRF-CHIMERE e di dati acquisiti da strumentazione distribuita sul territorio", 4° Congresso nazionale sul Particolato Atmosferico PM2010, Venezia 18-20 maggio 2010.
72. Ranieri Urbani, Paola Sist, Sergio Cozzutto, Gianpiero Barbieri, Pierluigi Barbieri "Indagine chimica e tossicologica dell'esposizione a polveri ed inquinanti atmosferici di lavoratori outdoor nell'area di Muggia (Trieste)", 4° Congresso nazionale sul Particolato Atmosferico PM2010, Venezia 18-20 maggio 2010.
73. Federico Cozzi, Obaseki Olubunmi, Matteo Crosera, Michela Sesso, Gianpiero Adami, Luca Marchiol, Pierluigi Barbieri "Barriere verdi e particolato "non-exhaust type" da traffico veicolare", 4° Congresso nazionale sul Particolato Atmosferico PM2010, Venezia 18-20 maggio 2010.
74. Sabina Licen, Sergio Cozzutto, Gianpiero Barbieri, Massimo Casanova, Pierluigi Barbieri "Confronto tra simulazioni di dispersione di PM e misure sperimentali in prossimità di un inceneritore in un distretto mobiliere", 4° Congresso nazionale sul Particolato Atmosferico PM2010, Venezia 18-20 maggio 2010.
75. Pasquale de Ceglie, Sergio Cozzutto, Pierluigi Barbieri, Luigi Giorgini, Italo Pellegrini, Giulio Pojana, Armando Miliazza "Studi analitici su componenti organiche dell'aerosol secondario", 4° Congresso nazionale sul Particolato Atmosferico PM2010, Venezia 18-20 maggio 2010.
76. Paolo Plossi, Tommaso Pinat, Fabiano Turoldo, Paola Busetto, Pierluigi Barbieri "Stima delle emissioni di particolato sottile PM2.5 da sorgenti industriali ed urbane in Provincia di Trieste", 4° Congresso nazionale sul Particolato Atmosferico PM2010, Venezia 18-20 maggio 2010.
77. Paolo Plossi, Paola Busetto, Pierluigi Barbieri "Incidenza dei progetti di nuovi impianti energetici sulla qualità dell'aria e le emissioni di particolato sottile in Provincia di Trieste", 4° Congresso nazionale sul Particolato Atmosferico PM2010, Venezia 18-20 maggio 2010.
78. Luigi Giorgini, Jari Falomo, Nicola Skert, Italo Pellegrini, Arnold Pastrello, Sergio Cozzutto, Pierluigi Barbieri "Validità del monitoraggio degli IPA aerodispersi tramite Quadrelli come accumulatori passivi. Aspetti applicativi e sperimentali in confronto a campionatori attivi di PM10", 4° Congresso nazionale sul Particolato Atmosferico PM2010, Venezia 18-20 maggio 2010.

79. Sabina Licen, Sergio Cozzutto, Gianpiero Barbieri, Massimo Casanova, Pierluigi Barbieri "Confronto tra simulazioni di dispersione di PM e misure sperimentali in prossimità di un inceneritore in un distretto industriale" XII Congresso Nazionale di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali, Taormina, 26-30 settembre 2010
80. Sergio Cozzutto, Sabina Licen, Pierluigi Barbieri "Approccio integrato al problema delle molestie olfattive provenienti da impianti di stoccaggio di idrocarburi" XII Congresso Nazionale di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali, Taormina, 26-30 settembre 2010
81. Michela Sesso, Federico Cozzi, Obaseki Olubunmi, Matteo Crosera, Gianpiero Adami, Sabina Licen, Pierluigi Barbieri "Barriere verdi per contenere il trasporto di composti tossici presenti nel particolato emesso da traffico veicolare" XII Congresso Nazionale di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali, Taormina, 26-30 settembre 2010
82. Della Torre, M. Sesso, S. Cozzutto, A. Altobelli, P. Barbieri "Applicabilità del fitorimediazione per l'attenuazione della contaminazione in siti inquinati da IPA invecchiati e studi sui flussi di carbonio nei lotti sperimentali" XII Congresso Nazionale di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali, Taormina, 26-30 settembre 2010
83. P. Barbieri, S. Covelli, G. Barbieri, P. Bevilacqua, E. Dazzan, B. Della Vedova "Analisi chimiche, geofisiche e sedimentologiche in siti costieri contaminati: sviluppo di una procedura per la prioritizzazione degli interventi in scenari complessi sul fronte mare" XII Congresso Nazionale di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali, Taormina, 26-30 settembre 2010
84. P. De Ceglie, M. Casanova, F. Cozzi, S. Cozzutto, L. Giorgini, Susanna Marras, G. Pojana, P. Barbieri "Studi spettroscopici e cromatografici sul particolato organico secondario: effetto di ossidanti atmosferici e componenti biogeniche" XII Congresso Nazionale di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali, Taormina, 26-30 settembre 2010

## Conferenze su invito

1. E. Alessio „Ruthenium-porphyrin conjugates for anticancer activity". 10th European Biological Inorganic Chemistry Conference (Eurobic10), Thessaloniki (Greece), June 22 – 26, 2010
2. B. Milani "Pd-catalyzed oligo- and polymerization reactions: how subtle changes in the ligand properties can induce large effects" 17<sup>th</sup> International Symposium on Homogeneous Catalysis. Poznan (Poland), 4 – 9 July 2010.
3. L. Pasquato, "Gold nanoparticles protected by fluorinated thiolates: synthesis and properties". Spanish Italian Symposium on Organic Chemistry, 3-6 luglio 2010, Padova.
4. M. Stener, "A TDDFT study on the dichroism in the photoelectron angular distribution from a chiral transition metal compound". Gordon Research Conference: "Photoions, Photoionization & Photodetachment", January 31 - February 5, 2010, Hotel Galvez, Galveston (Texas - USA). Invited talk.
5. M. Stener, G. Fronzoni, " The TDDFT approach for the description of core electron excitations in bulk materials and large clusters". Actinet I3 Workshop: Coupling XAS and Theoretical Chemistry for Heavy Atoms. Avignon (F), 23-24 June 2010, invited talk.
6. P. Decleva, "Photoionization of Oriented Molecules". 10th European Conference on Atom, Molecules and Photons (ECAMP 10), Salamanca, Spain, July 4-9, 2010, invited talk.
7. S. Coriani, "Magneto-optical effects within response function theory". EuroMagNET II QUANTUM CHEMISTRY IN STRONG MAGNETIC FIELD workshop. Toulouse, France, September 13-14, 2010 (invited talk)
8. S. Coriani "Density-matrix based formulation of KS response theory with applications to linear and non-linear spectroscopies" Nordic-Chinese symposium on Molecular Bio- and Nanoscience Hefei, China, September 20-25, 2010 (invited talk)
9. P. Barbieri: "Mobilità sostenibile" Convegno "Ambiente Urbano e Beni Culturali" - Sep Padovafiere, 22/04/2010.
10. S. Licen: "Modelli matematici per la valutazione della dispersione di inquinanti in atmosfera: tipologie e criteri di scelta del modello opportuno"; "La catena modellistica di simulazione di dispersione di inquinanti "Calmet-Calpuff": utilizzo del software e campo di applicazione"; "Le tecniche di modellizzazione di dispersione di inquinanti nel contesto legislativo: esempi applicativi sul territorio del Friuli Venezia Giulia" presso Dipartimento di Chimica - Università degli Studi di Bari (29/09/2010 - 01/10/2010) seminari svolti nell'ambito dell'attività di formazione prevista dal progetto strategico SIMPA PS\_122 "Sistema Integrato per il Monitoraggio del Particolato Atmosferico" co-finanziato dalla Regione Puglia.

## **ALLEGATO D**

### **Collaborazioni Nazionali e Internazionali**

#### **COLLABORAZIONI CON ENTI DI RICERCA ITALIANI**

- Università di Bari
- Università della Basilicata
- Università di Bologna
- Università di Cagliari
- Università della Calabria
- Università di Catania)
- Università di Chieti
- Università di Ferrara
- Università di Firenze
- Università dell'Insubria
- Università di Messina
- Università di Milano
- Università di Milano Bicocca
- Università di Modena e Reggio Emilia.
- Università "Federico II" di Napoli
- Università Parthenope di Napoli
- Università di Padova
- Università di Parma
- Università di Pavia)
- Università di Roma "La Sapienza"
- Università di Salerno
- Università di Sassari
- Università di Torino
- Università di Udine.
- Università di Urbino
- Università di Venezia
- Politecnico di Torino
- Scuola Normale Superiore, Pisa.
- ICCOM-CNR – Firenze
- ISS Roma
- ISTM-CNR-Milano
- CNR Napoli.
- Istituto per i Processi Chimico-Fisici del CNR, Pisa
- ISM-CNR Roma
- CNR-INFN, Laboratorio Nazionale TASC, Trieste, Italy
- CNR-Istituto di Metodologie Inorganiche e dei Plasmi (Monterotondo), Roma
- Istituto di Fisica Applicata, CNR, Sesto Fiorentino (FI)
- ICGEB Trieste
- INFN Democritos Center Trieste, Italy.
- Regione Autonoma Friuli Venezia Giulia – Centro Regionale di Catalogazione e Restauro dei Beni CulturaliSISSA, Trieste
- IRCCS Burlo Garofolo
- AOUST, Trieste
- Sincrotrone Trieste

## **COLLABORAZIONI CON ENTI DI RICERCA STRANIERI**

- Centro atomico di Bariloce (Argentina)
- Università di Graz, Dip. di Farmacognosia, (Austria)
- Università di Namur (Belgio)
- University of Mons-Hainaut, Materianove, Mons(Belgio)
- Università di Zagabria, Facoltà di Farmacia, (Croazia)
- The Lundbeck Foundation Center for Theoretical Chemistry, Department of Chemistry, University of Aarhus, (Danimarca)
- Université Cezanne, Institut des Sciences Moléculaires de Marseille, Marseille (Francia)
- Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg Groupe des Matériaux Organiques, CNRS, Strasbourg, (Francia).
- Université Louis Pasteur, Strasbourg, Institut de Science et d'Ingénierie Supramoléculaires (I.S.I.S.), (Francia)
- Université de Strasbourg et CNRS Laboratoire de Chimie des Matériaux Moléculaires, (UMR 7509), Ecole Européenne de Chimie, Strasbourg, (Francia)
- Université Paul Sabatier, Tolosa (Francia)
- Université de Toulouse 3, Tolosa (Francia)
- University of Berlin (Germania)
- University of Cologne, (Germania)
- Heinrich-Heine-University Düsseldorf, Institute of Pharmaceutics and Biopharmaceutics, (Germania)
- Università di Erlangen (Germania)
- Università di Würzburg (Germania)
- Demokritos National Centre for Scientific Research, Institute of Physical Chemistry Athens, (Grecia)
- National and Kapodistrian University of Athens, Department of Chemistry, Athens, (Grecia)
- Foundation of Research and Technology Hellas, Patras, (Grecia).
- Aristotle University of Thessaloniki, School of Pharmacy, Thessaloniki, (Grecia)
- Indian Institute of Technology-Madras, (India)
- College of Medicine and Health, Cork, (Irlanda)
- Università di Dublino (Irlanda)
- Weizmann Institute of Science, Department of Materials and Interfaces, Rehovot, (Israele).
- Photon Factory, Institute of Material Structure Science, KEK, Tsukuba-shi, Ibaraki 305-0801, Japan
- Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University, Sendai 980-8577, Japan
- National Cancer Institute, Amsterdam (Olanda)
- Politecnico di Delft, Delft, (Olanda).
- Università di Eindhoven (Olanda)
- University of Groningen, Materials Science Centre, (Olanda)
- Centre for Theoretical and Computational Chemistry, Department of Chemistry, University of Oslo, (Norvegia)
- Centre for Theoretical and Computational Chemistry, Department of Chemistry, University of Tromsø, (Norvegia)
- Universidade de Lisboa, Dipartimento di Tecnologia Farmaceutica, Lisbona, (Portogallo)
- Russian Academy of Sciences, Pushchino, Moscow Region, (Russia)
- Università Statale di Mosca, Mosca (Russia).
- National Institute of Chemistry, Ljubljana, Slovenia
- Università di Lubiana, Dipartimento di Biologia Farmaceutica, Facoltà di Farmacia, Slovenia.
- University of Ljubljana, Chair of Biopharmaceutics and Pharmacokinetics, Faculty of Pharmacy, Slovenia
- University of Cadiz, Spagna
- Università di Castilla La Mancha (Spagna)
- Universidad Autonoma, Madrid (Spagna)
- Università di Tarragona (Spagna)
- Universität Basel, Institut für Physik, (Svizzera).
- FRIAS Friburgo, (Svizzera)
- EPFL, Department of Materials Science and Engineering, Lausanne, (Svizzera)
- Paul Scherrer Institut, Lab. fuer Micro- and Nanostructures, Villigen (Svizzera)
- ETH Zurich, Laboratorium fuer Organische Chemies, (Svizzera).
- KTH, Stoccolma, (Svezia)
- Royal Institute of Technology, Stockholm, (Svezia)

- Chalmers University of Technology, Department of Applied Physics, (Svezia)
- National Taiwan University, Taipei (Taiwan)
- Università Tecnica di Yildiz, Dip. Ingegneriachimica, Facoltà di chimica e metallurgia, Istanbul, Turchia
- Middle East Technical University, Ankara, Turkey
- Università di Cambridge (UK)
- Daresbury Laboratory, Daresbury, Warrington, Cheshire WA4 4AD, (UK)
- Imperial College Department of Materials, London, (UK)
- Queen Mary University of London, (UK)
- School of Pharmacy Londra, (UK)
- Clemson University, Department of Chemistry, USA.
- Simulation Plus, California, USA
- University of Pennsylvania, USA
- Texas A&M University, College Station, Texas, USA.
- The National University of Uzbekistan
- Pomeranian Academy of Sciences, Slupsk (Polonia)
- Università di Nova Gorica (Slovenia)

#### COLLABORAZIONI INDUSTRIALI

- 3FMetals
- Alder S.p.A.
- Cetena S.p.A.,
- Chemtex- Mossi&Gisolfi
- Farmaderbe s.r.l. Pradamano (UD).
- Fincantieri S.p.A.
- Illycaffè S.p.A. - Trieste
- Italiana Membrane S.p.A. – Pasiano di Pordenone
- LIMA LTO
- NEALYS Srl
- Novozymes A/S, Danimarca.
- Resindion-Mitsubishi Chem. Corp. – Milano
- RottapharmSpA, Monza – Italy
- Skye Pharma A.G. Muttenez, CH
- SPRIN S.r.L., Trieste.
- UCB
- Vomm - Impianti e Processi, Rozzano – Milano
- ZaCh. System S.p.A.
- **SIOT Spa**
- Palazzetti Lelio Spa
- Crabo group Spa
- SRA Instruments Spa
- MicroFox srl
- LEnviroS srl
- Analitica Strumenti srl
- ARCO Solutions srl

## **ALLEGATO E**

### **Seminari tenuti presso il Dipartimento**

George Britovsek

Department of Chemistry - Imperial College London

Towards Catalytic Alkane Oxidation via O<sub>2</sub> Insertion into Platinum Methyl Bonds

15 novembre 2010

Stefano Della Longa

Dipartimento di Medicina Sperimentale - Università dell'Aquila

XANES Spectroscopy of hemes and hemeproteins: Structural analysis by the Multiple Scattering approach

29 ottobre 2010

Ranga Rao

Indian Institute of Technology Madras, Department of Chemistry, Chennai India

Can Ce<sub>x</sub>Zr<sub>1-x</sub>O<sub>2</sub> materials be suitable supports for polyoxometallates ?

29 settembre 2010

Remco Havenith

Theoretical Chemistry, Zernike Institute for Advanced Materials, RUG, Groningen, The Netherlands

Spin states in transition metal compounds

15 luglio 2010

Jan Mocak

Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, University of Ss. Cyril and Methodius, Slovak Republic

RECURRENT RELATIONS AND CHEMOMETRIC CALCULATIONS

28 giugno 2010

Luca Argenti

Dipartimento di Fisica dell'Università di Stoccolma

Ionization branching ratio control in helium with a resonance attosecond clock

19 aprile 2010

Siglinda Perathoner

Dipartimento di Chimica Industriale e Ingegneria dei Materiali - Università di Messina

COMBUSTIBILI SOLARI: NUOVE OPPORTUNITA' PER LA RICERCA

1 marzo 2010