

## ALLEGATO A TEMATICHE DI RICERCA

### CHIMICA ANALITICA ED AMBIENTALE

#### **Metodologie innovative per l'analisi e la speciazione chimica di metalli in campioni ottenuti da esperimenti di permeazione ed escrezione cutanea.**

PARTECIPANTI: Prof. E. Reisenhofer, Prof. G. Adami. Non strutturati: Dott. M. Crosera (Dottorando in Scienze della Prevenzione)

PUBBLICAZIONI: 1

FINANZIAMENTI: PRIN (bando 2006): 48.600 Euro (comprensivo della quota di cofinanziamento)

#### **Metodo di sverniciatura "Film-stripping" con solventi non tossici.**

PARTECIPANTI: Prof. E. Reisenhofer, Prof. G. Adami, Non strutturati: Dott. M. Crosera (Dottorando in Scienze della Prevenzione)

FINANZIAMENTI: Progetto Sister – Liaison Office (Università degli Studi di Trieste, Consorzio per l'Area di Ricerca di Trieste): 24.000 Euro (comprensivo della quota di cofinanziamento)

#### **Tecniche analitiche innovative per lo studio degli inquinanti nell'ambiente atmosferico e marino**

PARTECIPANTI: Prof. E. Reisenhofer, Prof. G. Adami. Non strutturati: Dott. F. Cozzi (Dottorando in Scienze della Prevenzione)

PUBBLICAZIONI: 2

**Caratterizzazione analitica e valutazioni di rischio per inquinanti da sorgenti industriali, domestiche e da trasporti.** L'unità di ricerca prosegue gli studi volti al modellamento della presenza di idrocarburi policiclici aromatici aerodispersi nell'abitato di Servola a Trieste in prossimità di un impianto siderurgico, focalizzando l'attenzione sul PM10. Si sono iniziati studi per la minimizzazione di artefatti di campionamento dovuti a ossidanti atmosferici e per l'automazione delle analisi DTD-GC-MS, di composti semivolatili nel PM<sub>x</sub> e in altre matrici ambientali. Sono state messe in atto collaborazioni con l'agenzia regionale per l'ambiente, ARPA-FVG, sulla valutazione di campionatori passivi innovativi per IPA nell'aria ambiente. Si è proceduto all'elaborazione di dati da spettro-microscopie XRF e da spettroscopie XANES con sorgente di luce di sincrotrone, per caratterizzare la distribuzione dimensionale di elementi d'interesse e per la caratterizzazione speciativa di specie solforate su campioni di PM<sub>10</sub>.

L'unità di ricerca è stata referente per la valutazione delle emissioni in atmosfera per un progetto di impianti di produzione di energia elettrica da combustione di pollina avicola. Sono state condotte ricerche su sistemi di filtrazione multistadio per PM<sub>x</sub> ed abbattimento fotocatalitico di NO<sub>x</sub>, progettati da systemlife s.r.l. per essere applicati in ambienti semiconfinati e nelle ferrovie metropolitane sotterranee.

PARTECIPANTI: Pierluigi Barbieri: Personale non strutturato: Luca di Monte (dottorando), Jari Falomo (dottorando), Sergio Cozzutto (dottorando), Gianpiero Barbieri (studioso ospite).

PUBBLICAZIONI: 2

FINANZIAMENTI:

- Convenzione di studio "Dossier Energia da Biomassa: valutazioni su impianto di produzione di energia elettrica 1MWe da combustione di pollina" Eukrasia Srl € 12000
- Convenzione di studio "Studio sperimentale sull'azione di mitigazione dell'inquinamento da polveri PM10 della stazione filtrante SystemLife modello Città, con campionamenti a Feltre (BL) e per lo studio di fattibilità di uno studio sperimentale da svolgersi a Trieste" SytemLife Srl, € 13500
- Convenzione di studio sulle prestazioni ambientali della stazione filtrante SystemLife, SystemLife Srl, € 7000
- Società Italiana per l'Oleodotto Transalpino: finanziamento di una borsa di dottorato

**Studi su bioaccumulo e degradazione di inquinanti organici.** Sono stati sviluppati, in collaborazione con ARPA-FVG, metodi automatizzati SPME-GC-MS per valutare le concentrazioni di composti organostannici in acque, sedimenti e biota. Si sono parimenti effettuati studi sul bioaccumulo di idrocarburi policiclici aromatici in *Mytilus galloprovincialis* in aree con sorgenti industriali attive e in aree prossime a siti contaminati costieri, evidenziando processi di detossificazione. Si è studiato il bioaccumulo di inquinanti organici e metalli in molluschi terrestri (*Helix aspersa*, *Eobania vermiculata*), per valutarne l'applicabilità in

programmi di biomonitoraggio. La degradazione di idrocarburi petroliferi nei suoli è stata valutata in esperimenti di microcosmo, e si sono effettuati studi di rizodegradazione (*Festuca arundinacea*, *Lolium perenne*, *Vetiveria zizanioides*, *Medicago sativa*) in campo sperimentale e in serra. Si è sviluppato un modello per valutare l'applicabilità del fitorimedio e dell'attenuazione naturale monitorata al sito di interesse nazionale "Trieste". Si è predisposto, per la parte chimica, il piano di attualizzazione della caratterizzazione del sito contaminato "Acquario".

PARTECIPANTI: Pierluigi Barbieri: Personale non strutturato: Luca Di Monte (dottorando), Jari Falomo (dottorando), Lorenzo Capriglia (dottorando), Sergio Cozzutto (dottorando), Giulia Pignolo (dottoranda), Chiara Della Torre (dottoranda), Michela Sesso (dottoranda).

PUBBLICAZIONI: 1

FINANZIAMENTI:

- Provincia di Trieste, cofinanziamento progetto "Definizione di procedure e sperimentazione del fitorimedio per la riduzione del rischio e l'attenuazione della contaminazione in siti inquinati" (€ 3340)
- Comune di Muggia, "Progetto di attualizzazione della caratterizzazione del sito contaminato denominato "Acquario" (€ 2500)
- Università di Trieste, Finanziamento Giovani ricercatori 2007 "Bioaccumulo di microinquinanti in gasteropodi terrestri nella provincia di Trieste" (€ 4000)
- Consorzio Interuniversitario "la Chimica per l'Ambiente" INCA: cofinanziamento di una borsa di dottorato
- Provincia di Trieste: cofinanziamento di due borse di dottorato
- Cooperativa Agricola "Monte San Pantaleone": cofinanziamento di una borsa di dottorato

**Caratterizzazione chimica e studi archeometrici su reperti storici.** Si sono effettuate caratterizzazioni GC-MS del contenuto unguentari provenienti dagli scavi archeologici di Magdala (II); nel luglio 2008, si sono effettuati campionamenti *in situ* di ulteriori reperti e si è organizzata una caratterizzazione estesa della componente organica. Su frammenti ceramici tratti da vasi di forma inusuale è stata effettuata una caratterizzazione con tecniche di attivazione neutronica, finalizzata al confronto con reperti di origine certa. Sull'alabarda di San Sergio (o "*Signum Sancti Sergii de Trigesto*"), sono state effettuate termografie e analisi ai raggi X, utili ad identificare le tecniche di forgiatura ed a indirizzare indagini chimiche pianificate per l'anno 2009.

PARTECIPANTI: Pierluigi Barbieri: Personale non strutturato: Mirta Sibia (Laureanda), Luca di Monte (dottorando), Federico Cozzi (dottorando).

## SPETTROSCOPIA MOLECOLARE

**Indagine mediante spettroscopia NMR multinucleare di soft condensed matter.** Sono state condotte indagini sull'autoassociazione di molecole anfifiliche mediante spettroscopia NMR sia dei nuclei a spin 1/2, ma soprattutto di quelli quadrupolari. E' stato dimostrato che la molecola di N<sub>2</sub>, che si trova disciolta nei sistemi liquido cristallini liotropici, in quanto normalmente si lavora in aria o in atmosfera di azoto, costituisce un probe non perturbativo del sistema, mediante lo splitting quadrupolare residuo che compare negli spettri NMR dell'<sup>14</sup>N. In collaborazione con l'Università Ca' Foscari di Venezia è stata studiata, per mezzo di <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C NMR e determinazione dei coefficienti di auto-diffusione via PGSTE-NMR, la microemulsione inversa impiegata come mezzo di reazione per la sintesi di nanoparticelle di SiO<sub>2</sub>. In questo modo sono stati chiariti alcuni punti irrisolti, quali la localizzazione dell'EtOH e la stabilizzazione delle nanoparticelle formatesi.

PARTECIPANTI: Prof. G. Pellizer, Dott. F. Asaro. Non strutturati: Dott. N. Savko (dottorando)

PUBBLICAZIONI: 1

FINANZIAMENTI: PRIN bando 2006: 39.150 Euro (comprensivo della quota di cofinanziamento)

**Studi spettroscopici su substrati SERS-attivi nano strutturati.** Sono stati condotti studi SERS sulle modalità di adsorbimento superficiale di inibitori di corrosione legati a superfici metalliche nanostrutturate. Sono stati, inoltre, preparati nuovi substrati SERS-attivi con caratteristiche di maggiore riproducibilità rispetto alle soluzioni colloidali mono e bimetalliche. L'efficienza di tali substrati è stata quindi testata tramite misure SERS. Ulteriori indagini su reazioni catalitiche subite da nitroderivati adsorbiti su

nanoparticelle di Ag/Pd sono state condotte tramite spettroscopia SERS. La morfologia delle nanoparticelle è stata monitorata tramite spettroscopia UV-visibile e microscopia ESEM. Al fine di interpretare i risultati ottenuti, sono stati condotti calcoli quantomeccanici DFT su modelli di adsorbimento delle molecole studiate sulle superfici metalliche.

PARTECIPANTI: Prof. A. Bigotto. Non strutturati: Dr. B. Pergolese (borsista).

FINANZIAMENTO: PRIN bando 2006: 39.150 Euro (comprensivo della quota di cofinanziamento)

## CHIMICA TEORICA

**a) Fotoionizzazione molecolare.** In collaborazione con due gruppi sperimentali giapponesi sono state studiate le distribuzioni angolari dei fotoelettroni da molecole orientate ( $CF_4$ ) e da dimeri di gas nobili ( $Ne_2$ ). Sono stati inoltre indagati gli effetti non dipolari, fotoionizzazione dalla soglia L di  $SF_5CF_3$  ed è stato anche intrapreso uno studio per la descrizione di molecole in presenza di impulsi laser ultracorti.

**b) Proprietà di sistemi estesi e cluster.** Sono state studiate le proprietà ottiche di una serie di cluster neutri e monoanionici di formula generale  $MAu_{12}$ , costituiti da una gabbia icosaedrica di atomi d'oro contenente al centro un metallo di transizione, con  $M = Mo, W, V, Nb, Ta$ . E' stato utilizzato uno schema di calcolo relativistico di tipo ZORA con accoppiamento spin-orbita. Sono stati anche indagati gli effetti elettrostatici nella descrizione teorica di cristalli e superfici ioniche.

**c) Proprietà di risposta molecolare a campi elettromagnetici.** Il codice di risposta lineare TDDFT linear-scaling sviluppato nel 2007 è stato esteso alle proprietà di risposta dipendenti dalla frequenza d'ordine superiore, anche con uso di set di base dipendenti dalla perturbazione. La sua applicazione ha riguardato lo studio di: (i) polarizzabilità ed iperpolarizzabilità elettriche e momenti di transizione a uno e due fotoni di frammenti esagonali di un foglio di BN, (ii) 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 fluorobenzene, e l'effetto Buckingham in naftalene, fluorobenzene e furano. Il lavoro è stato portato avanti in collaborazione con i gruppi del Proff. P. Jørgensen a Aarhus (Danimarca) e K. Ruud a Tromsø (Norvegia).

**d) Spettroscopia Molecolare.** Caratterizzazione strutturale e spettroscopica di sistemi eterociclici. Determinazione delle conformazioni preferite in fase gassosa e soluzione di composti di corrente interesse biologico mediante calcoli accurati ab-initio e DFT. Interpretazione della struttura elettronica mediante studi sperimentali e teorici degli spettri di assorbimento, fotoionizzazione, trasmissione elettronica ed ESR.

PARTECIPANTI: Prof. P. Decleva, Prof. V. Galasso, Prof. G. Fronzoni, Prof. M. Stener, Dott. S. Coriani. Non strutturati: Dott. R. De Francesco (post-doc) Dott. A Nardelli (dottoranda)

PUBBLICAZIONI: 20

FINANZIAMENTI:

- PRIN2006: finanziamento biennale (2006-2008), quota locale 33000 € (comprensiva della quota di cofinanziamento), titolo del progetto: "MECCANICA QUANTISTICA MOLECOLARE: METODI DI CALCOLO ED ANALISI DI NUOVI FENOMENI", coordinatore nazionale Prof. F. Gianturco.
- PRIN2006: finanziamento biennale (2006-2008), quota assegnata 12500 €. Partecipazione come sottounità dell'UdR di Padova al progetto intitolato: "Strategie computazionali integrate per l'interpretazione di proprietà strutturali e dinamiche di sistemi nanostrutturali tramite sonde spettroscopicamente attive", coordinatore nazionale Prof. V. Barone.
- COST: nel 2008 è iniziata l'attività di un gruppo di lavoro nell'ambito della COST Action CM0702: Chemistry with Ultrashort Pulses and Free-Electron Lasers: Looking for Control Strategies Through "Exact" Computations (CUSPFEL)

## CHIMICA INORGANICA E BIO-INORGANICA

**Progettazione, sintesi e caratterizzazione strutturale di sistemi supramolecolari multicromoforici mediati da centri metallici.** 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. La costruzione di sistemi supramolecolari che incorporino sia porfirine che perilene-

bisimidi, in cui il numero, la posizione, la distanza e l'orientazione relativa dei cromofori (cioè la forma del sistema) siano definiti con esattezza, è di particolare interesse per l'ottenimento di processi fotoindotti. 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. E' possibile infatti sfruttare l'elevato numero di diverse geometrie di coordinazione dei composti dei metalli di transizione per costruire elaborate strutture supramolecolari, con caratteristiche topologiche che difficilmente potrebbero essere ottenute tramite i metodi classici di sintesi. Inoltre, la scelta dei leganti ancillari permette di modulare carica e polarità (e quindi solubilità) degli addotti finali e di introdurre ulteriori funzionalità (e.g. magnetiche, ottiche, redox, chiralità,..).

PARTECIPANTI: Prof. Enzo Alessio, Prof. Ennio Zangrando. Non strutturati: Dr. Elisabetta Iengo (co.co.co), Dr. Massimo Casanova (borsista).

PUBBLICAZIONI: 2

FINANZIAMENTI:

- Azione Integrata Italia – Spagna bando 2005: 8500 euro
- PRIN bando 2006: 65500 euro
- Reintegration Grant 2008 – 2011 (Dr. E. Iengo): 45.000 euro

**Sviluppo di composti antitumorali di rutenio.** L'attività di ricerca riguarda sia la sintesi di nuovi composti di rutenio che abbiano potenziale attività antitumorale che, soprattutto, lo sviluppo del NAMI-A (un composto di rutenio da noi sintetizzato anni fa) nella sperimentazione di fase clinica. E' infatti in avanzata fase di definizione uno studio di fase clinica 1-2 per la associazione terapeutica NAMI-A + Gemcitabina su pazienti affetti da non small cell lung carcinoma (NSCLC). Questo studio di tipo clinico-applicativo è fondamentale per poter stabilire l'efficacia del NAMI-A.

Per quanto riguarda la preparazione di nuovi composti di rutenio con potenziale attività antitumorale, sono stati studiati in particolare composti con leganti dicarbossilati. La ricerca consiste nell'ottenere composti di rutenio nei quali i tradizionali gruppi uscenti anionici, cioè i cloruri, siano sostituiti da altri gruppi anionici, in particolare carbossilati e di-carbossilati chelanti. Dal momento che le cinetiche di dissociazione dei leganti anionici saranno diverse nei due casi, è da aspettarsi una variazione dell'attività antitumorale dei nuovi composti rispetto a quelli originali, sperabilmente in senso positivo. Nel caso degli antitumorali a base di platino una simile variazione nella natura dei gruppi anionici uscenti ha portato al passaggio dal cisplatino (farmaco di prima generazione) al carboplatino (farmaco di seconda generazione e dotato di minore tossicità). Sono stati preparati e caratterizzati strutturalmente numerosi nuovi composti di Ru(II)-dmsodicarbossilati, sia mono- che di-nucleari, e ne è stato studiato il comportamento in soluzione acquosa. Si è osservato che i dicarbossilati possono coordinarsi come chelanti o come leganti a ponte, e che il modo di coordinazione è principalmente dettato dall'ingombro sterico esercitato dagli altri leganti del rutenio.

PARTECIPANTI: Prof. Enzo Alessio, Prof. Ennio Zangrando, Dr. Teresa Gianferrara (DSF).

PUBBLICAZIONI: 2

FINANZIAMENTI:

- Fondazione CRTrieste (2005): 250.000 euro
- Fondo Trieste: 295.000 euro (2005) + 106.500 euro (2005) + 150.000 euro (2006)
- Regione VFG, LR 11/2003, bando 2006: 15.000 euro

**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 le reazioni di oligo- e polimerizzazione del monossido di carbonio con olefine terminali, in particolare con alcheni aromatici. I sistemi catalitici si basano su complessi di palladio con leganti appartenenti alla serie dei 2,2'-bipiridili sostituiti in posizione 6 con gruppi alchilici chiral e chirali. I complessi ottenuti si sono rivelati dei buoni catalizzatori per la reazione di oligomerizzazione CO/stirene, reazione che non è stata riportata prima in letteratura. La ricerca ha riguardato lo studio dei vari parametri della reazione, quali ad esempio la temperatura, la pressione di monossido di carbonio, la presenza di 1,4-benzochinone, la presenza di un

eccesso di legante rispetto al palladio, sulla produttività del sistema catalitico e sulle caratteristiche dei prodotti ottenuti. Sono stati anche condotti degli studi meccanicistici sulla reattività dei complessi usati come precatalizzatori con il monossido di carbonio.

In contemporanea sono anche stati studiati dei derivati dendrimerici di Pd(II) quali catalizzatori per la reazione di copolimerizzazione CO/stirene e CO/4-Me-stirene. I dendrimeri studiati appartengono alla famiglia delle n-ammino-propil-immine. Sono stati studiati i dendrimeri di prima e seconda generazione e l'attività catalitica dei corrispondenti derivati di palladio è stata confrontata con quella di derivati simili mononucleari. Le produttività ottenute con i derivati dendrimerici sono modeste; vi è un effetto dendrimerico positivo sulla stereoregolarità dei polichetoni sintetizzati che è sempre superiore al 90%.

PARTECIPANTI: Dr. B. Milani – Prof. Ennio Zangrando. Non Strutturati: Dr. Angela D'Amora (Assegnista)

PUBBLICAZIONI: 4

FINANZIAMENTI: PRIN bando 2005: 78 620 € (comprensivo della quota di cofinanziamento)

### **Sviluppo di materiali polimerici idrolizzabili da impiegare come leganti per pitture antivegetative a basso impatto ambientale**

L'attività di ricerca ha riguardato la sintesi e la caratterizzazione di co- e terpolimeri contenenti alcheni polari, da impiegare quali leganti per vernici antivegetative per la nautica. Le reazioni di polimerizzazione sono di tipo radicalico e vengono promosse da un opportuno attivatore. Per motivi di riservatezza non è possibile fornire in questo contesto ulteriori dettagli.

PARTECIPANTI: Dr. B. Milani. Non Strutturati: Dr. Anna Maria Fontanot (Borsista)

FINANZIAMENTI: Marlin S.r.L.: 50 000 €

### **Sintesi di composti organometallici di metalli del gruppo del platino e loro impiego in catalisi omogenea.**

1) Organoderivati di iridio sono stati impiegati quali catalizzatori omogenei per reazioni di trasferimento di idrogeno; in particolare sono state studiate: (i) la riduzione di polichetoni per produrre i corrispondenti polialcoli (postpolimerizzazione); (ii) reazioni di deidrogenazione selettiva del glicerolo.

2) Studio della carbosilazione diretta di substrati organici con diossido di carbonio, catalizzata da composti organometallici di rodio.

PARTECIPANTI: E. Farnetti.

PUBBLICAZIONI: 1

FINANZIAMENTI: Donazione della Fondazione Kathleen Foreman Casali (2007) € 13000.

**Composti di coordinazione a struttura polimerica aventi proprietà magnetiche.** E' continuata la collaborazione tra il Laboratorio di Strutturistica e l' "Indian Association for the Cultivation of Science" (Calcutta, India) sulla sintesi, la caratterizzazione, lo studio delle proprietà di nuovi 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 leganti organici polifunzionali neutri (bipiridina, ammine, ecc.) e anionici (ossalato, squarato, ecc.).

PARTECIPANTI: Prof. E. Zangrando

**Sistemi supramolecolari host-guest.** Il progetto riguarda la sintesi non covalente e la caratterizzazione strutturale di sistemi host-guest mediante tecniche cristallografiche. Nel corso dell'anno 2008 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 resorcinarrenico, 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. Parallelamente a questa ricerca è stato caratterizzato mediante diffrazione di raggi-X un catalizzatore che sviluppa in maniera estremamente efficiente ossigeno molecolare e che è stato ottenuto per self-assembly di un sistema polioxometallato con un cluster tetranucleare di rutenio(IV), studio svolto in collaborazione con la Dr. M. Bonchio dell'Università di Padova.

PARTECIPANTI: Prof. S. Geremia, Prof. L. Randaccio Non strutturati: Dott. R. De Zorzi (dottoranda)

PUBBLICAZIONI: 2

FINANZIAMENTI: "Cristallizzazione "High throughput" e caratterizzazione di strutture supramolecolari autoassemblate" PRIN 2006: 68.572 Euro (comprensivo della quota di cofinanziamento)

**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,  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$  NMR (1D e 2D), spettrometria di massa ES-MS ed elettroforesi. I derivati bioconiugati sono stati metallati con  $\text{Gd}^3$  e i metalloderivati sono stati caratterizzati in soluzione tramite elettroforesi e ES-MS. È stata determinata la struttura allo stato solido del complesso dinucleare derivante dalla cristallizzazione di uno dei bioconiugati in presenza di un eccesso di  $\text{Gd}^{3+}$  (vedi attività Prof. Geremia). È 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 biocongiugato, 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. Fedeosov dell'università di Aarhus, DK, è stata valutata l'affinità dei bioconiugati nei riguardi della transcobalamina.

PARTECIPANTI: Prof. R. Dreos. Non strutturati: Dott.ssa P. Siega (borsista post-dottorato)

PUBBLICAZIONI: 1 in corso di stampa

FINANZIAMENTI: PRIN 2006-2008

**Sintesi, caratterizzazione ed elettrochimica di complessi organometallici di cobalto (III) utilizzati quali complessi modello per la vitamina B12 e quali "building blocks" per strutture polinucleari e supramolecolari.** Le molecole sintetizzate sono state caratterizzate in soluzione tramite spettroscopia UV-vis, NMR, CD, etc. La caratterizzazione allo stato solido tramite raggi X di alcune molecole è stata effettuata in collaborazione col Prof. L. Randaccio e il Prof. E. Zangrando.

PARTECIPANTI: Prof. R. Dreos. Dott. C. Tavagnacco. Non strutturati: Dott.ssa Patrizia Siega (borsista post-dottorato)

PUBBLICAZIONI: 1

**Caratterizzazione del comportamento elettrochimico di citocromi c in soluzione ed adsorbiti su superfici elettrodiche.**

È stato studiato il comportamento elettrochimico di un citocromo c adsorbito su elettrodo di Au modificato, in presenza di urea. Lo scopo è quello di determinare parametri termodinamici delle varie forme che tale proteina di elettrone-transfer assume in diverse condizioni sperimentali. Il lavoro è stato condotto in collaborazione col Gruppo del Prof. M. Borsari, Dipartimento di Chimica, Università di Modena.

PARTECIPANTI: Dott. C. Tavagnacco. Non strutturati: Dott. S. Peressini (borsista).

## **BIOCRISTALLOGRAFIA**

**Cristallizzazione e struttura RX della transcobalamina umana e bovina e di bioconiugati delle B12.**

La transcobalamina (TC) è una proteina di trasporto dei corrinoidi presente nel plasma dei mammiferi che permette l'uptake cellulare della vitamina B12. Le transcobalamine umana (409 a.a.) e bovina (415 a.a.), con omologia superiore al 70% sono state risolte cristallizzate e strutturalmente caratterizzate, la TC bovina e umana, in complesso con la cobalamina. La determinazione strutturale ha mostrato che la TC è costituita da due domini, uno di  $\alpha$ -eliche, legate da tre ponti disolfuro, e uno prevalentemente di foglietti beta. La cobalamina, nella sua forma base-on (il residuo benzimidazolico della catena nucleotidica della cobalamina coordinato al cobalto) è legata fra il dominio ad elica e quello a foglietto e il centro metallico coordina, in posizione trans al gruppo benzimidazolico, il residuo istidinico 175 di un'elica. Sono stati ottenuti e caratterizzati strutturalmente i complessi TC-cianocobalammina e solfitocobalammina. La conoscenza della struttura ha indicato interessanti nuove prospettive di sintesi più 'ragionata' di bioconiugati della B<sub>12</sub> per l'imaging o per il trasporto di antitumorali. Il biocongiugato della cianocobalammina con DTPA-Gd ha mostrato interessanti proprietà antitumorali. È stato anche studiato lo spettro elettronico della cianocobalammina mediante calcoli DTF.

PARTECIPANTI: Dr. J. Wuerges, Prof. S. Geremia, Prof. L. Randaccio

PUBBLICAZIONI: 1.

FINANZIAMENTI: RBNE03PX83\_003 dal titolo "Folding e aggregazione di proteine: metalli e biomolecole nelle malattie conformazionali" gestito dal C.I.R.C.M.S.B. 25.000,00 euro

**Studi biocristallografici di proteine.** La determinazione della struttura della Transcobalamina, la proteina di trasporto della vitamina B12, ottenuta negli anni precedenti ha permesso lo sviluppo di bioconiugati della B12 per l'imaging e per il trasporto di antitumorali. Nel corso del 2007 si sono sintetizzati e caratterizzati due nuovi bioconiugati della B12 che hanno la capacità di complessare ioni delle terre rare. Uno di questi composti ha mostrato l'interessante proprietà di poter internalizzare in celle leucemiche livelli citotossici di ioni Gd(III). Lavoro svolto in collaborazione con il Prof. S. Aime dell'Università di Torino.

E' proseguito lo studio strutturale della proteasi HIV e di alcune sue varianti associate alla farmacoresistenza complessate con farmaci e nuovi inibitori. Nel corso del 2007 si sono ottenute le strutture cristalline di alcuni nuovi complessi proteina/inibitore. In particolare, si è studiata la reazione avvenuta nel cristallo di un epossido sviluppato come inibitore covalente dal gruppo del Prof. Benedetti. L'immagine a livello atomico 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 sintesi.

Si è continuato il progetto relativo all'espressione, purificazione della fosfodiesterasi umana (famiglia PDE4) e struttura a raggi X di suoi complessi con inibitori svolto in collaborazione con la Chiesi Farmaceutici. E' in corso l'espressione di un mutante che mima la fosforillazione presente in questo enzima.

E' proseguito lo studio strutturale di complessi ternari della maltodestrina fosforilasi.

PARTECIPANTI: Prof. S. Geremia, Prof. L. Randaccio Non strutturati: Dr. J. Wurges, (assegnista), N. Demitri (dottorando), Dott. R. De Zorzi (dottoranda), M. De March (dottorando) F. M. Olajuyigbe (dottoranda ospite)

PUBBLICAZIONI: 2

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;
- Espressione, purificazione della fosfodiesterasi umana (famiglia PDE4) e struttura a raggi X di suoi complessi con inibitori." Contratto con la Chiesi Farmaceutici (Parma), 40.000 Euro.
- RBNE03PX83\_003 dal titolo "Folding e aggregazione di proteine: metalli e biomolecole nelle malattie conformazionali" gestito dal C.I.R.C.M.S.B. 25.000,00 Euro;
- "Nanoproteine sintetiche autoassemblate" PRIN 2006; 73.500 Euro.

#### **CHIMICA DEI MATERIALI NANOSTRUTTURATI**

**Studio dell'attività e della stabilità di catalizzatori e precursori metallici per la produzione e purificazione di idrogeno, preparati con la tecnica della nanostrutturazione tramite l'uso di monomeri e polimeri templanti.**

PARTECIPANTI: Prof. M. Graziani, Prof. P. Fornasiero. Non strutturati: Dott. T. Montini (assegnista), dott.ssa M. Bevilacqua (assegnista), Dott.ssa B. Lorenzut (dottoranda)

PUBBLICAZIONI: Deposito di una domanda di brevetto internazionale. Risultati soggetti a confidenzialità.

FINANZIAMENTI: Contratto Idealab. Srl, 20.000 Euro. Finanziamento di un assegno di ricerca comodato d'uso per un valore di 20.000 Euro.

**Sviluppo di materiali da impiegarsi nel settore dell'energia.** Progettazione, realizzazione e caratterizzazione strutturale e funzionale di catalizzatori per la produzione e purificazione dell'idrogeno. Progettazione di innovativi materiali per celle a combustibile ad ossidi solidi (SOFC). Studio dell'influenza della composizione e della microstruttura di materiali catodici sulla conducibilità specifica e sulle prestazioni di cella. Studi computazionali su tali materiali.

PARTECIPANTI: Prof. M. Graziani, Prof. P. Fornasiero, Dott. G. Balducci, Dott. C. Tavagnacco. Non strutturati: Dott. T. Montini (assegnista), dott.ssa V. Gombac (assegnista),

PUBBLICAZIONI: 9.

FINANZIAMENTI:

- Convenzione con Consorzio INSTM per assegno di studio - 20.000 Euro
- Finanziamento ICCOM-CNR

**Sviluppo di fotocatalizzatori a base di TiO<sub>2</sub> per la produzione sostenibile di idrogeno.** Studi computazionali, sintesi e caratterizzazione di innovativi fotocatalizzatori.

PARTECIPANTI: Prof. M. Graziani, Prof. P. Fornasiero, Dott. G. Balducci, Non strutturati: Dott. T. Montini (assegnista), dott.ssa V. Gombac (assegnista).

PUBBLICAZIONI: 2.

FINANZIAMENTI: PRIN 2007, 25.000 Euro.

**Catalisi eterogenea ambientale e nano materiali.** In collaborazione con Nanoxer s.r.l, sono stati focalizzati problemi relativi allo sviluppo di materiali nanostrutturati a base di ossidi di Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ed i loro compositi con proprietà di tipo Aerogel-like. E' stato messo a punto lo scale-up del processo di sintesi industriale degli aerogel. Sono state analizzate le metodologie di ingegnerizzazione dell'ossido nanocomposito in un prodotto isolante, ininfiammabile e ad elevata stabilità termica. Nell'ambito della catalisi ambientale (progetto ECOMOS) è stata messa a punto un impianto pilota per lo studio di sistemi di abbattimento di fumi da motori marini. E' stato anche condotto uno studio di catalizzatori per la conversione di NO<sub>x</sub> in presenza di SO<sub>2</sub>, osservando l'effetto inusuale di SO<sub>2</sub> nel promuovere la rimozione di NO. Sono stati infine condotti studi su applicazioni di fotocatalisi per la purificazione di acque reflue industriali.

PARTECIPANTI: Prof. J. Kaspar., Dr. N. Hickey, Dr. R. Di Monte (co.co.co), dott. E. Padovese (dottoranda), dott. I. Boscarato (dottorando)

PUBBLICAZIONI: 2

FINANZIAMENTI:

- RINA VE: € 246.500, triennale;
- ECOMOS – FIRB: € 185.000, triennale.
- APQ Legno € 50.000, triennale.

## **CHIMICA ORGANICA E BIO-ORGANICA**

**Sintesi di polietilenglicoli (PEG) multi- e polifunzionali. Sintesi e caratterizzazione di coniugati misti farmacologicamente attivi. Sintesi e attività di PEG-porfirine.** L'attività ha riguardato la preparazione e l'applicazione di nuovi PEG multi- e polifunzionali come nuovi sistemi per il rilascio e la stabilizzazione di farmaci. E' stata messa a punto una nuova procedura per l'assemblaggio di derivati del PEG multifunzionali (MultiPEG) contenenti funzionalità multiple per la coniugazione di molecole diverse sullo stesso supporto ad alto peso molecolare. Lo studio della sintesi di coniugati stabili al PEG si è rivolto all'ottenimento di coniugati misti portanti due molecole diverse ma sinergicamente bioattive legate allo stesso supporto polimerico. I coniugati ottenuti sono stati caratterizzati e saggiati per le loro proprietà farmacologiche. Ha avuto poi inizio un nuovo studio mirato a tecniche di PTC (terapia fotodinamica) utilizzando PEG-coniugati di sistemi porfirinici.

PARTECIPANTI: Prof. Gian Maria Bonora e Dr. Sara Drioli (borsista)

PUBBLICAZIONI: 3

FINANZIAMENTI: PRIN 2007 – Regione Friuli Venezia Giulia 2007

**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 nel realizzare sistemi cooperativi basati su nanoparticelle di oro come piattaforma e sfruttando il monostrato protettivo per avere una superficie che presenta i gruppi funzionali necessari ad esplicare una attività catalitica cooperativa o ad operare un riconoscimento multivalente. Molti sistemi naturali preposti al riconoscimento multivalente (o alla catalisi) non sono caratterizzati da un continuo di gruppi funzionali ma piuttosto da dai raggruppamenti di elementi preposti al riconoscimento. La realizzazione di questo tipo di organizzazione in nanoparticelle di oro è ancora in stato embrionale. Nell'affrontare questo argomento si è pensato possibile ottenere domini di gruppi funzionali sfruttando la reciproca fobicità di catene carboniose idrogenate e fluorurate. A questo scopo, nel corso del 2008, è stata messa a punto la sintesi di tioli perfluorurati solubili in solventi organici e alcuni anche in ambiente acquoso unendo ad una catena

perfluorurata vicina alla funzione tiolica una porzione ossoetilenica che conferisce la solubilità desiderata fino a portare il sistema in acqua aumentando le unità ossoetileniche. Successivamente è stata messa a punto la sintesi di nanoparticelle di oro protette da questi tioli anfifilici perfluorurati. Queste nuove nanoparticelle sono particolarmente interessanti in campo bio-medico per la capacità di trasportare piccole molecole quali scavenger radicalici o principi attivi.

Anche nel corso del 2008 è proseguita l'attività di ricerca per la sintesi di nuovi catalizzatori a base di nanoparticelle di oro su ceria per l'ossidazione preferenziale di CO in presenza di idrogeno e acqua.

In collaborazione con ZaCh System del gruppo Zambon è stato studiato il meccanismo di ciclizzazione della gabapentina a lattame. La gabapentina è un principio attivo di farmaci utilizzati in diverse patologie, l'uso più noto è come anticonvulsivo nei trattamenti dell'epilessia. Il lattame invece è tossico.

PARTECIPANTI: Prof. Lucia Pasquato. Non strutturati: Dott.ssa Cristina Gentilini (borsa post dottorato), Dott.ssa Alice Pace (dottorando), Dott.ssa Mariangela Boccalon (borsista).

PUBBLICAZIONI: 4 + 2 in corso di stampa.

FINANZIAMENTI:

- Progetto Regione FVG bando 2006: 80.000 Euro (in comune con altri gruppi del dipartimento)
- Zambon Group S.p.A.: 30.000 Euro (per il 2008)

**Sistemi supramolecolari: funzioni di catalisi, trasporto e sensing.** 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 2008 l'attenzione è stata maggiormente focalizzata sulla sintesi e studio di ionofori artificiali sia a base peptidica che contenenti calixareni. In particolare con questa ultima classe di composti si è evidenziato un'interessante selettività nei confronti del trasporto di anioni e anche una modesta attività antiproliferativa nel confronto di cellule tumorali.

PARTECIPANTI: Prof. Paolo Tecilla. Non strutturati: Dott. Sabina Licen (dottorando).

PUBBLICAZIONI: 2

FINANZIAMENTI:

- PRIN bando 2006: 105.000 Euro (comprensivo della quota di cofinanziamento)
- Progetti Regione FVG bando 2005: 80.000 Euro (in comune con altri gruppi del dipartimento)

**Progettazione, sintesi e reattività di composti enantiomericamente puri, building block per sistemi bioattivi.** Una parte del progetto ha riguardato la sintesi di GABA analoghi in forma enantiomericamente pura mediante risoluzione cinetica enzimatica di 2-(nitrometil)alcanoati. I composti ottenuti sono stati poi trasformati in acidi 2-alchilsuccinici enantiomericamente puri. Un'altra parte ha riguardato lo studio di reazioni catalizzate da prolina tra composti  $\alpha$ -dicarbonilici, come il 2,3-butanedione e l'1,2-cicloesandione, e il  $\beta$ -nitrostirene per la formazione di pirrolizidine. Sono stati altresì ottenuti derivati otticamente attivi del 2-idrossipentanone. L'1,2-cicloesandione ha inoltre fornito dei biciclo[3.2.1]ottanoni e una spiroirrolizidina. Uno studio condotto su paraconati  $\gamma$ -piridil sostituiti utilizzando sia enzimi purificati che diversi lieviti ha invece portato all'ottenimento di  $\gamma$ -lattoni  $\gamma$ -funzionalizzati otticamente attivi di cui è stata attribuita la configurazione assoluta.

PARTECIPANTI: Prof. G. Pitacco, Prof. E. Valentin, Prof. P. Nitti, Prof. F. Felluga, Dott. C. Forzato. Non strutturati: Dott. C. D. Venneri (dottorando)

PUBBLICAZIONI: 3

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

**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-arillpiridinica, che sono stati ottenuti derivati dai corrispondenti alcoli secondari. Questi sono stati preparati in forma otticamente pura con buone rese attraverso la risoluzione cinetica dinamica dei rispettivi 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.

PARTECIPANTI: Prof. F.Felluga, Prof. F. Benedetti, Prof. G.Pitacco. Non strutturati: Dott. L.Fanfoni (dottoranda).

PUBBLICAZIONI: 1

FINANZIAMENTI: Regione Friuli-Venezia Giulia LR 11/2003, bando 2006: Nuovi metodi catalitici applicabili alla produzione industriale di molecole bioattive. 60.000 Euro.

**Isosteri di dipeptidi, peptidomimetici ed inibitori di proteasi.** Il progetto riguarda la messa a punto di nuove metodologie per la sintesi stereoselettiva di isosteri di dipeptidi contenenti più centri stereogenici e il loro utilizzo come "building blocks" di inibitori peptidomimetici di proteasi aspartiche. Nel corso dell'anno 2008 sono state sviluppate ed ottimizzate alcune metodologie per la preparazione di isosteri diamminodiolici del dipeptide Phe-Pro recanti sostituenti sull'anello della prolina; queste strutture sono state identificate attraverso uno studio di structure-based design condotto in collaborazione con ICS-UNIDO; sono state inoltre sviluppate metodologie per la sintesi di isosteri monoidrossietilenici.

PARTECIPANTI: Prof. F. Benedetti, Dott. F. Berti. Non strutturati: Dott. P. Campaner (dottorando), Dott. A. Ostric (dottorando), Dott. M. Merajuddin Baag (borsista).

PUBBLICAZIONI: 1

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

**Peptidi ad attività recettoriale.** Il progetto, sviluppato in collaborazione con il Dipartimento di Scienze della Vita e con Biosensor Technologies s.r.l. riguarda la progettazione, preparazione e caratterizzazione di librerie di piccoli peptidi ad attività recettoriale destinati ad essere usati come trasduttori primari nello sviluppo di biosensori. In particolare nel corso dell'anno 2008 sono stati ottenuti peptidi a 35 amminoacidi capaci di riconoscere le xantine. Il peptide KE1, la cui sequenza deriva da quella del leucine zipper EK, riconosce caffeina e teofillina con buona selettività ed un'affinità micromolare. Sono state studiate le sue proprietà di folding e stabilità in soluzione, ed è stata ottenuta la struttura RX del peptide che corrispondere a un omotrimerico parallelo. Sono quindi stati sintetizzati mutanti del peptide capaci di complessare metalli in prossimità del sito di legame per le xantine, e sono inoltre state preparate nuove librerie di peptidi. Un'altra parte del progetto, in collaborazione con il Dipartimento dei Materiali e delle Risorse Naturali, riguarda lo sviluppo di sistemi per la determinazione rapida della palitossina, composto estremamente tossico di origine algale recentemente rinvenuto anche nel mare Adriatico. Nell'ambito di questo progetto sono stati preparati nel corso del 2008 alcuni bioconiugati della palitossina con proteine immunogeniche, allo scopo di avviare procedure di immunizzazione volte a ottenere anticorpi mono- e policlonali contro la tossina. La palitossina è una delle molecole più complesse mai sintetizzate, avendo oltre 60 centri stereogenici su 114 atomi di carbonio. Oltre alla sua bioconiugazione, è stata avviata anche la sintesi di un frammento della molecola, con l'intenzione di ottenere anticorpi, peptidi e polimeri sintetici per il riconoscimento di questo singolo frammento

PARTECIPANTI: Prof. F. Benedetti, Dott. F. Berti. Non strutturati: Dott. G. Fontanive (dottorando).

PUBBLICAZIONI: 1

FINANZIAMENTI:

- Contratto Biostrands s.r.l. 18.000 Euro
- Regione Friuli-Venezia Giulia LR 26/2005, bando 2006: progetto SENSTOX, 80.000 Euro.

**ALLEGATO B**  
**Pubblicazioni e brevetti 2008**

1. F. COZZI, G. ADAMI, P. BARBIERI, E. REISENHOFER AND M. BOVENZI. **Is PM10 mass measurement a reliable index for air quality assessment? An environmental study in a geographical area of north-eastern Italy.** ENVIRONMENTAL MONITORING AND ASSESSMENT, 144, 389-401 (2008).
2. S. COZZI, E. REISENHOFER, L. DI MONTE, C. CANTONI, G. ADAMI. **Effect of environmental forcing on the fate of nutrients, dissolved organic matter and heavy metals released by a coastal wastewater pipeline.** CHEMISTRY AND ECOLOGY, 24, 87-107 (2008).
3. F. LARESE FILON, F. D'AGOSTIN, M. CROSER, G. ADAMI, M. BOVENZI, G. MAINA. **In vitro percutaneous absorption of chromium powder and the effect of skin cleanser.** TOXICOLOGY IN VITRO, 22, 1562-1567 (2008).
4. A. ASTEL; S. TSAKOVSKI; V. SIMEONOV; E. REISENHOFER; S. PISELLI; BARBIERI P.. (2008). **Multivariate Classification and Modelling in the assessment of surface water quality.** ANALYTICAL AND BIOANALYTICAL CHEMISTRY. Vol. 390 (5). pp. 1283-1292.
5. FALOMO J; CAPRIGLIA L; PENZO A; GIORGINI L; BARBIERI P.. (2008). **Monitoraggio di inquinanti organici persistenti nel Golfo di Trieste.** LA CHIMICA E L'INDUSTRIA. Vol. 7. pp. 111-113.
6. E. ZANGRANDO; M. CASANOVA; ALESSIO E.. (2008). **Trinuclear metallacycles: metallatriangles and much more.** CHEMICAL REVIEWS. Vol. 108. pp. 4979-5013.
7. I. BRATSOS; A. BERGAMO; G. SAVA; T. GIANFERRARA; E. ZANGRANDO; ALESSIO E.. (2008). **Influence of the anionic ligands on the anticancer activity of Ru(II)-dmsO complexes: kinetics of aquation and in vitro cytotoxicity of new dicarboxylate compounds in comparison with their chloride precursors..** JOURNAL OF INORGANIC BIOCHEMISTRY. Vol. 102. pp. 606-617.
8. I. BRATSOS; S. JEDNER; A. BERGAMO; G. SAVA; T. GIANFERRARA; E. ZANGRANDO; ALESSIO E.. (2008). **Half-sandwich RuII-[9]aneS3 complexes structurally similar to antitumor-active organometallic piano-stool compounds: preparation, structural characterization and in vitro cytotoxic activity..** JOURNAL OF INORGANIC BIOCHEMISTRY. Vol. 102. pp. 1120-1133.
9. M. CASANOVA; E. ZANGRANDO; E. IENGO; ALESSIO E.; M. T. INDELLI; F. SCANDOLA; M. ORLANDI. (2008). **Structural and Photophysical Characterization of Multichromophoric Pyridylporphyrin-Rhenium(I) Conjugates..** INORGANIC CHEMISTRY. Vol. 47. pp. 10407-10418.
10. J. DURAND; E. ZANGRANDO; C. CARFAGNA; B. MILANI. (2008). **New atropisomeric N-N ligands for CO/vinyl arene copolymerization reaction.** DALTON TRANSACTIONS. pp. 2171-2182.
11. MILANI B.; CROTTI C; FARNETTI E. (2008). **Hydrogen transfer reduction of polyketones catalyzed by iridium complexes: a novel route towards more biocompatible materials..** DALTON TRANSACTIONS. pp. 4659-4663.
12. MILANI B.; MASDEU-BULTO' A. M. (2008). **Ligand Chirality in Palladium Catalysed Polyketone Synthesis.** In GYULA PALYI; CLAUDIA ZUCCHI; LUCIANO CAGLIOTI. **Organometallic Chirality.** pp. 161-203. MODENA. Mucchi Editore. (Articolo su libro)

13. MILANI B.; SCAREL A; AXET M. R; AMOROSO F; RAGAINI F; ELSEVIER C. J; HOLUIGUE A; CARFAGNA C; MOSCA L. (2008). **Subtle Balance of Steric and Electronic Effects for the Synthesis of Atactic Polyketones Catalyzed by Pd-Complexes with meta-Substituted Aryl-BIAN Ligands.** ORGANOMETALLICS. Vol. 27. pp. 1486-1494.
14. PELLIZER G; ASARO F. (2008). **<sup>14</sup>N NMR spectra of molecular nitrogen in SDS/pentanol swollen lamellar phases.** MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY. Vol. 46. pp. S80-S85.
15. DE ROGATIS L; MONTINI T; CASULA MF; FORNASIERO P. (2008). **Design of Rh@Ce<sub>0.2</sub>Zr<sub>0.8</sub>O<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanocomposite for ethanol steam reforming.** JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS. Vol. 451. pp. 516-520.
16. DE ROGATIS L; MONTINI T; COGNIGNI A; OLIVI L; FORNASIERO P.. (2008). **Methane Partial Oxidation on NiCu-based catalysts.** CATALYSIS TODAY. Vol. 00. pp. 00.
17. DE ROGATIS L; MONTINI T; GOMBAC V; FORNASIERO P.. (2008). **Stabilized metal nanoparticles embedded into porous oxides: a challenging approach for robust catalysts.** In WESLEY V. PRESCOTT AND ARNOLD I. SCHWARTZ EDITORS. **Nanorods, Nanotubes and Nanomaterials Research Progress.** Vol. -. pp. 71-123. NEW YORK. Nova Science Publisher. (Articolo su libro)
18. DE ROGATIS L; MONTINI T; LORENZUT B; FORNASIERO P.. (2008). **NiCu/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> based catalysts for hydrogen production.** ENERGY & ENVIRONMENTAL SCIENCE. Vol. 1. pp. 509.
19. FITTIPALDI M; GOMBAC V; MONTINI T; FORNASIERO P.; GRAZIANI M. (2008). **A High-Frequency (95 GHz) Electron Paramagnetic Resonance Study of B-doped TiO<sub>2</sub> photocatalysts.** INORGANICA CHIMICA ACTA. Vol. 361. pp. 3980-3987.
20. FORNASIERO P.; MONTINI T; GRAZIANI M; ZILLIO S; SUCCI M. (2008). **Development of Catalytic Nanoceramic-loaded Fe-Al-Cr Alloy Fiber Media for Exhaust Gas Purification.** CATALYSIS TODAY. Vol. 137. pp. 475-482.
21. GENNARI F.C; MONTINI M; FORNASIERO P.; ANDRADE GAMBOA J.J. (2008). **REDUCTION BEHAVIOR OF NANOPARTICLES OF Ce<sub>0.8</sub>Zr<sub>0.2</sub>O<sub>2</sub> PRODUCED BY DIFFERENT APPROACHES.** INTERNATIONAL JOURNAL OF HYDROGEN ENERGY. Vol. 33. pp. 3549-3554.
22. HAMEED A; MONTINI T; GOMBAC V; FORNASIERO P.. (2008). **Surface Phases and Photocatalytic Activity Correlation of Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Bi<sub>2</sub>O<sub>4-x</sub> Nanocomposite.** JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. Vol. 130. pp. 9658-9659.
23. MONTINI T; SPEGHINI A; FORNASIERO P.; BETTINELLI M; GRAZIANI M. (2008). **Effect of the thermal pretreatments on ceria – zirconia redox properties: an Eu<sup>3+</sup> luminescence study.** JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS. Vol. 451. pp. 617-620.
24. NATILE M.M; POLETTO F; GALENDA A; GLISENTI A; MONTINI T; DE ROGATIS T; FORNASIERO P.. (2008). **La<sub>0.6</sub>Sr<sub>0.4</sub>Co<sub>1-y</sub>Fe<sub>y</sub>O<sub>3-d</sub> perovskites: influence of the Co/Fe atomic ratio on properties and catalytic activity towards alcohol steam-reforming.** CHEMISTRY OF MATERIALS. Vol. 20. pp. 2314-2327.
25. ROSSIN A; IENCO A; COSTANTINO F; MONTINI T; DI CREDICO B; CAPORALI M; GONSALVI L; FORNASIERO P.; PERUZZINI M. (2008). **Crystal-to-crystal phase transition and CO<sub>2</sub> adsorption properties of polymeric magnesium formate.** CRYSTAL GROWTH & DESIGN. Vol. 8. pp. 3302-3308.

26. VESSELLI E; DE ROGATIS L; DING X; BARALDI A; SAVIO L; VATTUONE L; ROCCA M; FORNASIERO P.; PERESSI M; BALDERESCHI A; ROSEI R; COMELLI G. (2008). **Hydrogen-assisted Carbon Dioxide Activation on Ni(110)**. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. Vol. 130. pp. 11417-11422.
27. GENTILINI C; BOCCALON M; PASQUATO L.. (2008). **Straightforward synthesis of fluorinated amphiphilic thiols**. EUROPEAN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY. pp. 3308-3313.
28. GENTILINI C; EVANGELISTA F; RUDOLF P; FRANCHI P; LUCARINI M; PASQUATO L.. (2008). **Water-soluble gold nanoparticles protected by fluorinated amphiphilic thiolates**. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. Vol. 130. pp. 15678-15682.
29. GUARISE C; MANEA F; ZAUPA G; PASQUATO L.; PRINS L. J; SCRIMIN P. (2008). **Cooperative Nanosystems**. JOURNAL OF PEPTIDE SCIENCE. Vol. 14. pp. 174-183.
30. ZAMBON E; GIVANETTI R; COTARCA L; PASQUATO L.. (2008). **Mechanistic investigation on 2-aza-spiro[4,5]decan-3-one formation from 1-(aminomethyl)cyclohexylacetic acid (gabapentin)**. TETRAHEDRON. Vol. 64. pp. 6739-6743.
31. C. FORZATO; G. FURLAN; P. NITTI; G. PITACCO; VALENTIN E.; E. ZANGRANDO; P. BUZZINI; M. GORETTI; B. TURCHETTI. (2008). **Chemoenzymatic and yeast-catalysed synthesis of diastereomeric ethyl gamma-phenyl and gamma-(n-pyridyl)paraconates**. TETRAHEDRON-ASYMMETRY. Vol. 19. pp. 2026-2044.
32. F.BERTI; C.FORZATO; G. FURLAN; P.NITTI; G. PITACCO; VALENTIN E.; E.ZANGRANDO. (2008). **Synthesis of Optically Active alfa-Benzyl Paraconic Acids and their Esters and Assignment of their Absolute Configuration**. TETRAHEDRON-ASYMMETRY.
33. F.GHELFI; M.PATTAROZZI; F.RONCAGLIA; A.F.PARSONS; F.FELLUGA; U.M.PAGNONI; VALENTIN E.; A.MUCCI; F.BELLESIA. (2008). **Preparation of the Maleic Anhydride Nucleus from Dichloro gamma-Lactams:Focus on the Role of the N-Substituent in the Functional Rearrangement and in the Hydrolytic Steps**. SYNTHESIS. pp. 3131-3141.
34. FELLUGA F; PITACCO G; VALENTIN E.; VENNERI C.D. (2008). **A facile chemoenzymatic approach to chiral non-racemic beta-alkyl-gamma-amino acids and 2-alkylsuccinic acids. A concise synthesis of (S)-(+)-Pregabalin**. TETRAHEDRON-ASYMMETRY. Vol. 19. pp. 945-955.
35. DRIOLI, S., BONORA, G.M., BALLICO, M., **Synthesis and characterization of new multifunctional high-molecular weight PEG derivatives (MultiPEG)s**, THE OPEN ORGANIC CHEMISTRY JOURNAL, 2008, 2, 17-25
36. ZACCHIGNA, M., CATENI, F., DI LUCA, G., VOINOVICH, D., DRIOLI, S., BONORA, G.M., **Synthesis of a new mPEG-Dexamethasone Conjugate and preliminary bioavailability studies in rabbits**, J. DRUG DEL. SCI.TECH., 2008, 18(3), 155-159
37. BONORA, G.M AND DRIOLI, S., **Recent advances on patents in poly(ethylene glycol)-based drug delivery**, RECENT PATENTS ON DRUG DELIVERY AND FORMULATION, 2008, 2, 189-195
38. FRECE V; BERTI F; BENEDETTI F.; MIERTUS S. (2008). **DESIGN OF PEPTIDOMIMETIC INHIBITORS OF ASPARTIC PROTEASE OF HIV-1 CONTAINING -PHEpsiPRO- CORE AND DISPLAYING FAVOURABLE ADME-RELATED PROPERTIES**. JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS & MODELLING. Vol. 27. pp. 376-387.

39. MORGERA F; ANTCHEVA N; PACOR S; QUARONI L; BERTI F.; VACCARI L; TOSSI, A. (2008). **Structuring and interactions of human  $\beta$ -defensins 2 and 3 with model membranes**. JOURNAL OF PEPTIDE SCIENCE. Vol. 14, 4. pp. 518-523.
40. A. KIVIMÄKI; J. ÁLVAREZ RUIZ; M. CORENO; M. STANKIEWICZ; G. FRONZONI; DECLEVA P.. (2008). **Photoelectron spectroscopy of sulfur L levels in the SF<sub>5</sub>CF<sub>3</sub> molecule**. CHEMICAL PHYSICS. Vol. 353. pp. 202.
41. BOLOGNESI P; TOFFOLI D; DECLEVA P.; FEYER V; FLAMMINI R; PRAVICA L.; AVALDI L. (2008). **The dipole and non dipole parameters of the N K shell of the N<sub>2</sub> molecule up to 80eV above threshold**. JOURNAL OF PHYSICS. B, ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS. Vol. 41. pp. 221002.
42. D. TOFFOLI; DECLEVA P.. (2008). **A Multicentric Approach to the Calculation of Non dipolar Effects in Molecular Photoemission**. THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. Vol. 128. pp. 234101.
43. FUKUZAWA H; LIU X.-J; TERANISHI T; SAKAI K; PRMPER G; UEDA K; MORISHITA Y; SAITO N; STENER M.; DECLEVA P. (2008). **Fluorine K-shell photoelectron angular distribution from CF<sub>4</sub> molecules in the molecular frame**. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. Vol. 451. pp. 182-185.
44. M. CAUSÀ; V. BARONE; M. STENER; FRONZONI G.. (2008). **Electrostatic effects on cluster simulation of ionic crystals and surfaces**. JOURNAL OF PHYSICS: CONFERENCE SERIES. Vol. 117. pp. 1-8.
45. M. STENER; A. NARDELLI; FRONZONI G.. (2008). **Spin-orbit effects in the photoabsorption of WAu<sub>12</sub> and MoAu<sub>12</sub>: a relativistic Time Dependent Density Functional study**. THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. Vol. 128. pp. 134307.
46. M. STENER; A. NARDELLI; FRONZONI G.. (2008). **Theoretical study on the photoabsorption of MAu<sub>2</sub>- (M = V, Nb, Ta)**. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. Vol. 462. pp. 358-364.
47. M. AWASTHI; Y.V. VANNE; A. SAENZ; A. CASTRO; DECLEVA P.. (2008). **Single-Active-Electron Approximation for Describing Molecules in Ultrashort Laser Pulses and Its Application to Molecular Hydrogen**. PHYSICAL REVIEW A. Vol. 77. pp. 063403.
48. ALBERTI A; GALASSO V.; KOVAC B; MODELLI A; PICHIERRI F. (2008). **Probing the molecular and electronic structure of capsaicin: A spectroscopic and quantum mechanical study**. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A, MOLECULES, SPECTROSCOPY, KINETICS, ENVIRONMENT, & GENERAL THEORY. Vol. 112. pp. 5700-5711.
49. KJÆRGAARD T; JØRGENSEN P; OLSEN J; CORIANI S.; AND HELGAKER T. (2008). **Hartree-Fock and Kohn-Sham time-dependent response theory in a second-quantization atomic-orbital formalism suitable for linear scaling**. THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. Vol. 129. pp. 054106
50. KULA M; CAPPELLI C; CORIANI S.; RIZZO A. (2008). **An ab-initio study of the magneto-optical rotation of diastereoisomers**. CHEMPHYSICHEM. Vol. 9. pp. 462-469.
51. SOLHEIM H; FREDIANI L; RUUD K; CORIANI S.. (2008). **An IEF-PCM study of solvent effects on the Faraday B term of MCD**. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS. Vol. 119. pp. 231-244.
52. SOLHEIM H; RUUD K; CORIANI S.; AND NORMAN P. (2008). **The A and B Terms of Magnetic Circular Dichroism Revisited**. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A,

- MOLECULES, SPECTROSCOPY, KINETICS, ENVIRONMENT, & GENERAL THEORY. Vol. 112. pp. 9615-9618.
53. SOLHEIM H; RUUD K; CORIANI S.; NORMAN P. (2008). **Complex polarization propagator calculations of magnetic circular dichroism spectra.** THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. Vol. 128. pp. 094103(1-7).
  54. THORVALDSEN A. J; RUUD K; KRISTENSEN K; JØRGENSEN P; CORIANI S.. (2008). **A density matrix-based quasienergy formulation of Kohn-Sham density functional response theory using perturbation- and time-dependent basis sets.** THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. Vol. 129. pp. 214108-(1-27).
  55. THORVALDSEN A. J; RUUD K; RIZZO A; CORIANI S.. (2008). **Analytic calculations of frequency-dependent hypermagnetizabilities and Cotton–Mouton constants using London atomic orbitals.** THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. Vol. 129. pp. 164110-(1-14).
  56. TOFFOLI D; DECLEVA P.. (2008). **Nondipolar effects in the photoionization dynamics of carbon tetrafluoride.** PHYSICAL REVIEW A. Vol. 78. pp. 063402.
  57. YAMAZAKI M; ADACHI J; KIMURA Y; YAGISHITA A; STENER M.; DECLEVA P; KOSUGI N; IWAYAMA H; NAGAYA K; YAO M. (2008). **Decay Channel Dependence of the Photoelectron Angular Distributions in Core Level Ionization of Ne Dimers.** PHYSICAL REVIEW LETTERS. Vol. 101. pp. 043004 1-4.
  58. GALASSO V.. (2008). **A DFT characterization of the structures and UV/vis absorption spectra of mauveine dyes.** CHEMICAL PHYSICS LETTERS. Vol. 457. pp. 250-253.
  59. GALASSO V.; KOVAC B; MODELLI A; OTTAVIANI M. F; PICHIERRI F. (2008). **Spectroscopic and theoretical study of the electronic structure of curcumin and related fragment molecules.** JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A, MOLECULES, SPECTROSCOPY, KINETICS, ENVIRONMENT, & GENERAL THEORY. Vol. 112. pp. 2331-2338.
  60. IZZO I; LICEN S; MAULUCCI N; AUTORE G; MARZOCCO S; TECILLA P.; DE RICCARDIS F. (2008). **Cationic calix[4]arenes as anion-selective ionophores.** CHEMICAL COMMUNICATIONS. pp. 2986-2988.
  61. LICEN S; DE RICCARDIS F; IZZO I; TECILLA P.. (2008). **Artificial anion transporters in bilayer membranes.** CURRENT DRUG DISCOVERY TECHNOLOGIES. Vol. 5. pp. 86-97.
  62. T. ANDRUNIÓW; M. JAWORSKA; P. LODOWSKI; M. Z. ZGIERSKI; R. DREOS; RANDACCIO L.; P. M. KOZŁOWSKI. (2008). **Time-dependent density functional theory study of cobalt corrinoids: Electronically excited states of methylcobalamin.** THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. Vol. 129. pp. 5101-5114. 10.1063/1.2956836.
  63. CAMPAGNOLO M; CAMPA C; DE ZORZI R.; WUERGES J; GEREMIA S.. (2008). **X-ray studies on ternary complexes of maltodextrin phosphorylase.** ARCHIVES OF BIOCHEMISTRY AND BIOPHYSICS. Vol. 471. pp. 11-19.
  64. SARTOREL A; CARRARO M; SCORRANO G; DE ZORZI R; GEREMIA S.; MCDANIEL N. D; BERNHARD S; BONCHIO M. (2008). **Polyoxometalate embedding of a tetraruthenium(IV)-oxo-core by template-directed metalation of [gamma-SiW10O36]8-: a totally inorganic oxygen-evolving catalyst.** JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. Vol. 130. pp. 5006-5007.

65. YEBEUTCHOU R. M; TANCINI F; DEMITRI N; GEREMIA S.; MENDICHI R; DALCANALE E. (2008). **Host-Guest Driven Self-Assembly of Linear and Star Supramolecular Polymers**. ANGEWANDTE CHEMIE. INTERNATIONAL EDITION. Vol. 47. pp. 4504-4508.
66. B.K. MUÑOZ; E.S. GARCIA; C. GODARD; E. ZANGRANDO; C. BO; A. RUIZ; C. CLAVER. (2008). **HPNMR study of the Pd-catalysed methoxycarbonylation of styrene using monodentate and bidentate phosphane modified systems**. EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY. pp. 4625-4637.
67. C. HIPPIUS; I.H.M. VAN STOKKUM; E. ZANGRANDO; R.M. WILLIAMS; M. WYKES; D. BELJONNE; F. WÜRTHNER. (2008). **Ground- and Excited-State Pinched Cone Equilibria in Calix[4]arenes Bearing Two Perylene Bisimide Dyes**. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. C, NANOMATERIALS AND INTERFACES. Vol. 112. pp. 14626-14638.
68. D. MONTAGNER; E. ZANGRANDO; B. LONGATO. (2008). **Role of the phosphine ligands on the stabilization of monoadducts of the model nucleobases 1-methylcytosine and 9-methylguanine in platinum(II) complexes**. INORGANIC CHEMISTRY. Vol. 47. pp. 2688-2695.
69. GRIFFITH D; CECCO S; ZANGRANDO E; BERGAMO A; SAVA G.; MARMION CJ. (2008). **Ruthenium(III) dimethyl sulfoxide pyridinehydroxamic acid complexes as potential antimetastatic agents: synthesis, characterisation and in vitro pharmacological evaluation**. JBIC.
70. K.S. BANU; T. CHATTOPADHYAY; A. BANERJEE; S. BHATTACHARYA; E. SURESH; M. NETHAJI; E. ZANGRANDO; D. DAS. (2008). **Catechol Oxidase Activity of a series of new Dinuclear Copper(II) Complexes with 3,5-DTBC and TCC as substrates: Syntheses, X-ray Crystal Structures, Spectroscopic Characterization of the adducts and Kinetic Studies**. INORGANIC CHEMISTRY. Vol. 47. pp. 7083-7093.
71. T. CHATTOPADHYAY; A. BANERJEE; K.S. BANU; E. SURESH; M. NETHAJI; E. ZANGRANDO; G. BIRARDA; D. DAS. (2008). **Cadmium-halide and mixed cadmium-halide-dicyanamide polymers mediated by ancillary 2-aminoalkyl-pyridine ligands: Synthesis, X-ray single crystal structures and luminescence property**. POLYHEDRON. Vol. 27. pp. 2452-2458.
72. P. HALDER; P.R. BANERJEE; E. ZANGRANDO; T.K. PAINE. (2008). **Effect of ligand spacer on metallosupramolecular architectures: from a dinuclear copper(II) double helicate to a tetranuclear copper(II) complex**. EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY. pp. 5659-5665.
73. R. ETTORE; B. LONGATO; E. ZANGRANDO. (2008). **A coordination polymer formed by cis-[(PMePh<sub>2</sub>)<sub>2</sub>Pt(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>] and 2,5-bis(4-pyridyl)-1,3,4-thiadiazole**. INORGANICA CHIMICA ACTA. Vol. 361. pp. 2985-2988.
74. S.C. MANNA; E. ZANGRANDO; J. RIBAS; N. RAY CHAUDHURI. (2008). **A 3D supramolecular network of cobalt(II)(bis(4-pyridyl)ethylene) with terephthalate dianions**. INORGANICA CHIMICA ACTA. Vol. 361. pp. 411-416.
75. S.C. MANNA; E. ZANGRANDO; J. RIBAS; N. RAY CHAUDHURI. (2008). **Supramolecular Isomerism in Coordination Polymers of Isophthalato-Bridged MnII Complexes Using 4,4'-Dipyridyl N,N'-Dioxide**. EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY. pp. 1400-1406.
76. S.C. MANNA; E. ZANGRANDO; N. RAY CHAUDHURI. (2008). **Dinuclear Cu(II) complexes using pyridine-2,6-dicarboxylate in combination with O/N donor spacer**. JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE. Vol. 877. pp. 145-151.

77. KASPAR J; BOSCARATO I; HICKEY N.. (2008). **Metodologie catalitiche per l'abbattimento degli inquinanti dei motori a combustione. La Nave e l'Ambiente: Controllo e Riduzione delle Emissioni.** pp. 45-60. GENOVA. CETENA. (Articolo su libro)
78. R.DI MONTE; KASPAR J.; H.BRADSHAW; C.NORMAN. (2008). **A rationale for the development of thermally stable nanostructured CeO<sub>2</sub>-ZrO<sub>2</sub>-containing mixed oxides.** JOURNAL OF RARE EARTHS. Vol. 26. pp. 136-140.
79. B. PERGOLESE, M.MUNIZ-MIRANDA AND A. BIGOTTO, “**SERS investigation on 4-nitro-3-pyrazolecarboxylic acid adsorbed on palladium-doped silver nanoparticles**”, *Vib. Spectrosc.*, **48**, 107-112 (2008).
80. B. PERGOLESE, M.MUNIZ-MIRANDA AND A. BIGOTTO, “**Surface Enhanced Raman Spectroscopic studies on 1H-1,2,4-triazole adsorbed on silver colloidal nanoparticles**”, *Vib. Spectrosc.*, **48**, 202-205 (2008).
81. M. MUNIZ-MIRANDA, B. PERGOLESE, A. BIGOTTO, “**Surface-Enhanced Raman Scattering and Density Functional Theory Study of 4-Nitrobenzonitrile Adsorbed on Ag and Ag/Pd Nanoparticles**”, *J.Phys.Chem. C*, **112**, 6988-6992 (2008).
82. BARBARA PERGOLESE, MAURIZIO MUNIZ-MIRANDA AND ADRIANO BIGOTTO, “**SERS study of the adsorption of 2-mercaptobenzoxazole on gold colloidal nanoparticles**”, in corso di stampa, disponibile online dal 13 Novembre 2008 (doi:10.1016/j.molstruc.2008.11.010).

#### **Brevetti/ domande di brevetto**

BERT P; CATANORCHI S; FORNASIERO P; GRAZIANI M.; LORENZUT B; MILLER H; MONTINI T; RAGNOLI M; SCAFFIDI A; TAMPUCCI A. (2008). **Catalizzatori per la produzione di gas di sintesi da reforming di idrocarburi o alcoli comprendenti un supporto in ZnO e loro uso.** Italian Patent FI2007A0000179.

R.Di Monte and J.Kaspar. **AEROGEL MATERIALS BASED ON METAL OXIDES AND COMPOSITES THEREOF.** WO2008/077876, published 3/7/2008.

## ALLEGATO C

### Partecipazioni a Congressi e seminari per invito.

F. Larese Filon, F. D'Agostin, M. Bovenzi, M. Crosera, G. Adami, C. Romano and G. Maina

Human skin penetration of silver nanoparticles: in-vitro assessment.

Eleventh International Perspectives in Percutaneous Penetration Conference, La Grande Motte (France), march 2008, Perspectives in Percutaneous Penetration, vol. 11, p 42. ISBN: 0 948917 37 0; STS Publishing UK (2008). Comunicazione orale.

Cesaro A., Gamini A., Rizzo R., Forzato C., Adami G.

Teaching chemistry to humanity students: is that really possible?

XI Congresso Nazionale di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali, Muggia (Trieste), 16-20 giugno 2008. Comunicazione orale

Cozzi F., Gržinić G., Cozzutto S., Adami G., Barbieri P.

Characterization of airborne particulate matter by synchrotron radiation micro-XANES and micro-XRF,

XI Congresso Nazionale di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali, Muggia (Trieste), 16-20 giugno 2008. Poster

Adami G., Zanchiello S., Giacomello A.

La sverniciatura chimica: proposte innovative per il restauro dei beni culturali

XI Congresso Nazionale di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali, Muggia (Trieste), 16-20 giugno 2008. Poster

F. Cozzi, E. Reisenhofer, P. Barbieri, M. Bovenzi, P. Apostoli e G. Adami

Determinazione analitica di metalli nel PM10 con tecnica ICP-MS e caratterizzazione di due siti della provincia di Trieste mediante PCA.

XXI Congresso Nazionale di Chimica Analitica, Arcavacata di Rende (CS), 21-25 settembre 2008. Poster

M. Crosera, F. Larese Filon, F. D'Agostin, M. Bovenzi, G. Maina, E. Reisenhofer e G. Adami

Assorbimento cutaneo in vitro di polveri di cobalto, nichel e cromo attraverso cute umana integra e lesa.

XXI Congresso Nazionale di Chimica Analitica, Arcavacata di Rende (CS), 21-25 settembre 2008. Poster

F. Filon Larese, F. D'Agostin, M. Crosera, M. Bovenzi, G. Adami, G. Maina,

Human skin penetration of silver nanoparticles.

2nd International Conference on Nanotoxicology, Nanotox2008 Zurich, 7 - 10 Settembre 2008. Poster

F. Larese Filon, F. D'Agostin, M. Crosera, G. Adami, R. Rosani, M. Bovenzi, A. Malvestio, G. Maina, Assorbimento percutaneo di nanoparticelle di argento nella cute danneggiata.

71° Congresso Nazionale SIMLII (Società Italiana di Medicina del Lavoro e Igiene Industriale). Palermo, 17-20 novembre 2008. Comunicazione orale

D. Centioli, M. Belli, I. Pellegrini, P. Barbieri, F. Cadoni, C. Ravaioli, S. Barbizzi, E. Calabretta, M. Potalivo, S. Balzamo, S. Gaudino, M. Buchetti, A. Pati, L. Giorgini, F. Filippi, J. Falomo, L. Capriglia, L. Di Monte, S. Cozzutto, S. Raccanelli.

QA/QC campaign: field comparison for PM10 and polycyclic aromatic hydrocarbons measurements in suspended particulate matter.

XI Congresso Nazionale di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali "Dalla Conoscenza alle Strategie di Intervento" Muggia (Trieste) 16-20/06/2008, Comunicazione Orale

P. Plossi, P. Busetto, C. della Torre, P. Barbieri

Industria, energia e trasporti a Trieste: autorizzazione integrata ambientale e sostenibilità.

XI Congresso Nazionale di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali "Dalla Conoscenza alle Strategie di Intervento" Muggia (Trieste) 16-20/06/2008, Comunicazione Poster

J. Falomo, N. Skert, L. Capriglia, L. Giorgini, R. Grahonja, P. Barbieri, N. Miani  
Impiego di matrici biologiche e sintetiche per la valutazione di IPA aerodispersi nella provincia di Trieste.  
XI Congresso Nazionale di Chimica dell’Ambiente e dei Beni Culturali “Dalla Conoscenza alle Strategie di Intervento” Muggia (Trieste) 16-20/06/2008, Comunicazione Poster

J. Falomo, L. Capriglia, L. Giorgini, P. Barbieri  
Messa a punto ed applicazione di metodiche alternative per la determinazione di composti organostannici in ambiente marino.  
XI Congresso Nazionale di Chimica dell’Ambiente e dei Beni Culturali “Dalla Conoscenza alle Strategie di Intervento” Muggia (Trieste) 16-20/06/2008, Comunicazione Poster

L. Capriglia, J. Falomo, L. Giorgini, L. Colugnati, T. Asquini, N. Miani, P. Barbieri  
Monitoraggio mediante mitili del rilascio a mare di contaminanti organici ed inorganici da un sito inquinato del comune di Muggia (TS)  
XI Congresso Nazionale di Chimica dell’Ambiente e dei Beni Culturali “Dalla Conoscenza alle Strategie di Intervento” Muggia (Trieste) 16-20/06/2008, Comunicazione Poster

L. Di Monte, M. Doz, G. Pignolo, P. Barbieri  
Bioaccumulo di microinquinanti organici in organi bersaglio di *Mytilus galloprovincialis*; indagini lungo la costa del golfo di Trieste  
XI Congresso Nazionale di Chimica dell’Ambiente e dei Beni Culturali “Dalla Conoscenza alle Strategie di Intervento” Muggia (Trieste) 16-20/06/2008, Comunicazione Poster

M. Sibilìa, F. Berti, S. Cozzutto, L. Di Monte, P. Barbieri  
Indagini preliminari su un portaparfumi proveniente da uno scavo archeologico a Magdala (Palestina) - I secolo D.C.  
XI Congresso Nazionale di Chimica dell’Ambiente e dei Beni Culturali “Dalla Conoscenza alle Strategie di Intervento” Muggia (Trieste) 16-20/06/2008, Comunicazione Poster

M. Sibilìa, G. Cuscito, F. Colombo, P. Barbieri  
Prime analisi e valutazioni sulla fattura dell’alabarda simbolo di Trieste  
XI Congresso Nazionale di Chimica dell’Ambiente e dei Beni Culturali “Dalla Conoscenza alle Strategie di Intervento” Muggia (Trieste) 16-20/06/2008, Comunicazione Poster

S. Cozzutto, L. Marino, F. Cozzi, R. Urbani, P. Sist, P. Barbieri  
Indagine su marker per la valutazione dei processi di degradazione di petroli greggi e oli pesanti nei suoli  
XI Congresso Nazionale di Chimica dell’Ambiente e dei Beni Culturali “Dalla Conoscenza alle Strategie di Intervento” Muggia (Trieste) 16-20/06/2008, Comunicazione Poster

C. della Torre, M. Sesso, L. Tramarin, M. Zupan, M. Dragan, P. Plossi, P. Barbieri  
Valutazioni su sostenibilità e applicabilità di approcci di bonifica a basso impatto nel SIN di Trieste  
XI Congresso Nazionale di Chimica dell’Ambiente e dei Beni Culturali “Dalla Conoscenza alle Strategie di Intervento” Muggia (Trieste) 16-20/06/2008, Comunicazione Poster

M. Sesso, C. della Torre, L. Di Monte, R. Urbani, P. Sist, P. Barbieri  
Laboratorio in campo ed in serra di fitorimediazione: attività sperimentale per il risanamento di siti inquinati  
XI Congresso Nazionale di Chimica dell’Ambiente e dei Beni Culturali “Dalla Conoscenza alle Strategie di Intervento” Muggia (Trieste) 16-20/06/2008, Comunicazione Poster

G. Pignolo, F. Cozzi, L. Di Monte, A. Mazzatenta, P. Barbieri  
Bioaccumulation of heavy metals and PAHs by *Helix aspersa* in contaminated soils of the province of Trieste: first results  
XI Congresso Nazionale di Chimica dell’Ambiente e dei Beni Culturali “Dalla Conoscenza alle Strategie di Intervento” Muggia (Trieste) 16-20/06/2008, Comunicazione Poster

S. Cozzutto, L. Di Monte, F. Cozzi, S. Racanelli, I. Pellegrini, P. Barbieri  
PM10 and PAHs around coke oven plant: results, occurred and “next to come” changes in measurement strategy

PM2008 III Convegno nazionale sul particolato atmosferico “Il particolato atmosferico: la conoscenza per l’informazione e le strategie di intervento” Bari 6-8/10/2008, Comunicazione Poster

S. Cozzutto, L. Di Monte, C. Vezzil, S. Racanelli, M. Palazzetti, G. Santarossa, F. Del Pup, P. Barbieri  
Emission from pellet stoves: results from a dilution tunnel approach

PM2008 III Convegno nazionale sul particolato atmosferico “Il particolato atmosferico: la conoscenza per l’informazione e le strategie di intervento” Bari 6-8/10/2008, Comunicazione Poster

P. Barbieri, S. Cozzutto, F. Cozzi, G. Barbieri, F. Pedrielli, E. Faggin, E. Faggin  
High capacity PM filtering stations: positioning and assessment of environmental performances

PM2008 III Convegno nazionale sul particolato atmosferico “Il particolato atmosferico: la conoscenza per l’informazione e le strategie di intervento” Bari 6-8/10/2008, Comunicazione Poster

P. Barbieri, L. Di Monte, S. Cozzutto, F. Cozzi

Analytical approaches for the safeguard of ambient air

Congresso Università e Impresa “Ricerca e innovazione tecnologica strumentale, metodologie analitiche e innovazioni strumentali a tutela dei comparti ambientali” Gorizia, 15-16/04/2008. Seminario su invito.

P. Barbieri

DL 152/2007: campionamento degli IPA

Workshop TECORA “Campionamento alle emissioni/immissioni: Aggiornamento sulle metodiche odierne” Milano, 15/10/2008. Seminario su invito.

B. Milani

Ligand symmetry and polymer tacticity in Pd-catalyzed stereocontrolled polyketone synthesis.

4<sup>th</sup> EuCheMS Conference on Nitrogen Ligands, Garmisch-Partenkirchen (Germania), 24 – 28 Agosto 2008, Session Lecture

B. Milani.

Recent developments in Pd-catalyzed polyketone synthesis

COST-Action D40 – 2<sup>nd</sup> meeting, Tarragona (Spain), 20 – 22 Maggio 2008, Comunicazione Orale

E. Farnetti, B. Milani

From CO/alkene polyketones to polyalcohols via iridium-catalyzed transfer hydrogenation

XVI International Symposium on Homogeneous Catalysis, Firenze, 6 – 11 Luglio 2008, Comunicazione Poster

I. Favier, F. Fernandez, G. Muller, E. Teuma, B. Milani, M. Gomez

Metallic nanoparticles stabilized by functionalized polymers: effect on catalytic hydrogenations

XVI International Symposium on Homogeneous Catalysis, Firenze, 6 – 11 Luglio 2008, Comunicazione Poster

B. Milani, F. Amoroso, C. Müller, E. Zangrando, F. Ragaini, M. Hagar, C. J. Elsevier, D. Vogt

Non-symmetric Ar-BIAN ligands in the Pd-catalyzed polyketone synthesis: a kinetic investigation

XVI International Symposium on Homogeneous Catalysis, Firenze, 6 – 11 Luglio 2008, Comunicazione Poster

B. Milani, F. Amoroso, A. D’Amora, E. Zangrando, R. Seraglia, F. Faraone,

Control of stereochemistry in polyketone synthesis catalyzed by Pd-complexes with chiral amine-imine ligands,

XXIII International Conference on Organometallic Chemistry, Rennes (Francia), 13 – 18 luglio 2008, Comunicazione Poster

Barbara Milani,  
Recent Developments in Palladium-Catalyzed Polyketones Synthesis,  
NanoConfiCat Meeting, Università Paul Sabatier di Tolosa (Francia), Marzo 2008, Seminario su invito.

Barbara Milani,  
From ligands to polymers in Pd-catalyzed polyketones synthesis: shedding light on catalyst stability and polymer structure,  
Universitat Rovira i Virgili, Tarragona (Spagna), Ottobre 2008, Seminario su invito

Barbara Milani,  
From ligands to polymers in Pd-catalyzed polyketones synthesis: shedding light on catalyst stability and polymer structure,  
Università di Zaragoza (Spagna), Ottobre 2008, Seminario su invito

E. Alessio, I. Bratsos, T. Gianferrara,  
Ruthenium anticancer compounds: challenges and expectations.  
9th European Biological Inorganic Chemistry Conference (EUROBIC9), Wroclaw, Poland, 2-6 September 2008. Keynote lecture (E. Alessio).

E. Alessio,  
Sorting out metal anticancer compounds with a focus on ruthenium,  
Working Group Meeting within COST Action D39, Leiden (The Netherlands), November 25-26, 2008.  
Invited lecture.

Enzo Alessio,  
Metal-mediated assemblies of porphyrins for photophysical applications,  
University of Zurich (CH), April 11, 2008.

Enzo Alessio,  
Ruthenium anticancer compounds, Université Louis Pasteur, Strasbourg (France), May 29, 2008.

Enzo Alessio,  
Metal-mediated assemblies of porphyrins for photophysical applications,  
Université Louis Pasteur, Strasbourg (France), June 5, 2008.

Enzo Alessio,  
Metal-mediated assemblies of porphyrins for photophysical applications,  
University of Twente, Enschede (The Netherlands), November 24, 2008.

F. Asaro, G. Pellizer,  
<sup>14</sup>N NMR of Nitrogen as Solute in Lyotropic Liquid Crystals.  
XXXVII Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana, Camogli (Genova), 24-29 febbraio 2008, Comunicazione orale

N. Savko, F. Asaro, G. Pellizer, A. Benedetti,  
Multinuclear NMR Spectroscopy in Silica Nanotechnologies.  
XXXVIII National Congress on Magnetic Resonance, Bressanone (Bolzano), 10-13 settembre 2008,  
Comunicazione poster

G.M. Bonora, S. Drioli,  
Synthesis and applications of multifunctional poly(ethylene glycol)s  
Small Molecule Drug Discovery: from early stage to the clinic, Antigua, 17-20 Gennaio 2008. Poster

V. Rapozzi, Drioli S., Bonora G.M., Xodo L.,  
Photodynamic activity of Pheophorbide from S.Barbata as a free molecule and conjugated to polyethylene glycol,  
PDT Annual Congress, Barcellona (Spagna), 7-8 marzo 2008. Poster

S. Drioli, G.M. Bonora, L. Xodo, V. Rapozzi,  
Synthesis and activity in photodynamic therapy of poly(ethylene glycol) conjugated Pheophorbide,  
53<sup>rd</sup> Annual Meeting of SIB and national Meeting of CSB section of SCI, Riccione, 23-25 Settembre 2008.  
Poster

V. Rapozzi, M. Miculan, S. Drioli, G.M. Bonora, L. Xodo,  
PDT effect in cancer cells of pheophorbide a, free or conjugated to polyethylene glycol, is mediated by lipid peroxidation.  
Photodynamic therapy and photodiagnosis in clinical practice, Bressanone, 7-11 ottobre 2008. Poster

G.M. Bonora,  
PEG-addition to oligonucleotides: a story with a future?  
53<sup>rd</sup> National Meeting of SIB and Section CSB of SCI- Riccione 2008

M. Bevilacqua, T. Montini, C. Tavagnacco, P. Fornasiero, M. Graziani,  
Preparazione, caratterizzazione e proprietà elettrochimiche di elettrodi puri e compositi a base di  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Ni}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{O}_3$  per catodi in IT-SOFC,  
Giornate dell'Elettrochimica Italiana - Elettrochimica per il Recupero Ambientale (GEI-ERA 2008), Genova, Italia, giugno 2008, Comunicazione Orale

B. Lorenzut, T. Montini, V. Gombac, P. Fornasiero, M. Graziani,  
 $\text{H}_2$  production from ethanol and methanol steam reforming over Co, Ni, Cu based catalysts,  
XVII Congresso Nazionale di Chimica Industriale - Energia, materiali e prodotti da tecnologie e processi eco-sostenibili, Genova, Italia, 30 giugno - 3 luglio 2008, Comunicazione Orale

F. C. Gennari, A. Condó, J. J. Andrade Gamboa, T. Montini, P. Fornasiero,  
Design of the synthesis of  $\text{Pd/Ce}_{0.8}\text{Zr}_{0.2}\text{O}_2$ : influence on  $\text{H}_2$  spillover.  
International Symposium on Metal-Hydrogen Systems-Fundamentals, and Applications, Reykjavik, Iceland, giugno 2008, Comunicazione Orale

F. C. Gennari, T. Montini, P. Fornasiero and M. Graziani,  
Influence of chloride ions on the interaction of deuterium with  $\text{Ce}_{0.6}\text{Zr}_{0.4}\text{O}_2$  mixed oxide,  
XV Symposium on Metastable, Amorphous and Nanostructured Materials ISMANAM 2008, Buenos Aires, Argentina, Luglio 2008, Comunicazione Orale

T. Montini, M. Cargnello, S. Mehraeen, C. Gentilini, N. Browning, L. Pasquato, P. Fornasiero, M. Graziani,  
Design of active and stable catalysts for  $\text{H}_2$  purification. Part 1: Development of Au-based catalyst for PROX Reaction,  
IV Workshop on Oxide Based Materials Novelties and Perspectives, Como, Italia, luglio 2008, Comunicazione Orale

T. Montini, M. Cargnello, S. Mehraeen, C. Gentilini, N. Browning, L. Pasquato, P. Fornasiero, M. Graziani,  
Design of active and stable catalysts for  $\text{H}_2$  purification. Part 2: Development of Pd-based catalyst for Water Gas Shift Reaction,  
IV Workshop on Oxide Based Materials Novelties and Perspectives, Como, Italia, luglio 2008, Comunicazione Poster

L.D. Vella, S. Specchia, L. De Rogatis, T. Montini, P. Fornasiero, G. Saracco, V. Specchia,  
Rh-based SCT-CPO reactors for syngas production,  
Convegno Gruppo di Ingegneria Chimica delle Università, Crotone, Italia, settembre 2008, Comunicazione Orale

- M. Cargnello, P. Fornasiero, C. Gentilini, M. Graziani, T. Montini, L. Pasquato, S. Polizzi,  
Stable gold nanoparticles for hydrogen purification reactions: a challenging approach for robust catalysts,  
5<sup>th</sup> ICFE, Belfast, Irlanda del Nord, settembre 2008, Comunicazione Orale
- S. Specchia, L. De Rogatis, T. Montini, L.D. Vella, G. Saracco, V. Specchia, P. Fornasiero,  
Rh-based catalysts for syngas production via SCT-CPO reactors,  
7<sup>th</sup> International Workshop on Catalytic Combustion, Zurigo, Svizzera, settembre 2008, Comunicazione Orale
- A. Hameed, T. Montini, V. Gombac, P. Fornasiero,  
Photocatalytic Degradation of Dyes on NiO-ZnO Nano-composites,  
5<sup>th</sup> European Meeting on Solar Chemistry and Photocatalysis: Environmental Application (SPEA 5),  
Palermo, Italia, ottobre 2008, Comunicazione Poster
- V. Gombac, T. Montini, P. Fornasiero, M. Graziani,  
Cu,Ni-doped TiO<sub>2</sub> for hydrogen photo-production,  
5<sup>th</sup> European Meeting on Solar Chemistry and Photocatalysis: Environmental Application (SPEA 5),  
Palermo, Italia, ottobre 2008, Comunicazione Poster
- P. Fornasiero,  
Aqueous-phase Reforming Process and Catalytic Hydrogen Production from Biomass,  
Workshop on Biofuels, Chemicals and Polymers from Bio-resources, Santa Fè, Argentina, ottobre 2008,  
Lezione su Invito
- M. Fittipaldi, M. L. Curri, V. Gombac, R. Comparelli, M. Striccoli, T. Montini, N. Grassi, C. Sangregorio, P.  
Fornasiero, D. Gatteschi,  
EPR Investigation of Modified TiO<sub>2</sub> Photo Catalyst,  
EUROMAR 2008, St. Petersburg, Russia, 6-11 Luglio 2008, Comunicazione Orale
- I. Boscarato, N. Hickey and J. Kašpar,  
NO and SO<sub>2</sub> simultaneous catalytic oxidation,  
Scuola di Catalisi GIC, "Dal Catalizzatore al processo: Principi, catalizzatori e mode", Pontignano (SI), 3-  
6 novembre 2008. Poster
- Jan Kašpar, Ilan Boscarato, Neal Hickey,  
Metodologie catalitiche per l'abbattimento degli inquinanti dei motori a combustione in  
"La Nave e l'Ambiente: Controllo e Riduzione delle Emissioni", II Giornata di Studio CETENA, Trieste, 10  
Giugno 2008. Presentazione orale su invito.
- N. Hickey, I. Boscarato and J. Kašpar,  
Advanced solutions for the pollution abatement from the ships cruising the motorways of the sea,  
5<sup>th</sup> International Conference on Environmental Catalysis, Belfast, 31st August to 3rd September 2008, oral  
presentation.
- N. Hickey,  
Pollution control in the Marine Sector,  
Università di Cagliari, Settembre 2009, Seminario su invito.
- S. Coriani, L. Ferrighi, C. Forzato, P. Nitti, M. Pianca, G. Pitacco,  
Studio computazionale degli spettri di dicroismo circolare elettronico di  $\gamma$ -metil derivati dell'acido  
paraconico, COFEM 2008, Giornate di Chimica Organica Fisica e Meccanicistica, Sestri Levante (GE), 25-  
26 settembre 2008, Comunicazione Orale.
- L. Fanfoni, F. Felluga, F. Benedetti, P. Rigo, W. Baratta,  
Chemo-enzymatic synthesis of chiral pincer ligands"  
BOSS XI, Ghent 13-18 luglio 2008, Book of Abstract pag 140, P116, Comunicazione Poster.

F. Felluga,  
L'approccio chemoenzimatico per la sintesi di 2-pirrolidinoni e di proline enantiomericamente puri (e relativi intermedi).  
Conferenza ad invito presso il Dipartimento di Chimica, Università di Modena e Reggio Emilia, 12.6.2008.

F. Benedetti.  
Sintesi stereoselettiva di isosteri di dipeptidi e inibitori della HIV-Proteasi.  
Università di Potenza, Febbraio 2008, Conferenza su invito.

C. Gentilini,  
"Gold Nanoparticles: Synthesis and Study of the Protecting Monolayer"  
Imperial College London, 7 February 2008.

C. Gentilini,  
"Gold Nanoparticles: Synthesis and Study of the Protecting Monolayer"  
ICIQ, Tarragona, 31 January 2008.

S. Coriani,  
"Molecular Response Properties of large systems: recent developments"  
"XXXVII Congresso Nazionale della Sezione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana", Camogli, Genova, February 28, 2008. Oral communication.

A. Kivimäki, J. Álvarez Ruiz, M. Coreno, M. Stankiewicz, M. de Simone, S. Svensson, G. Fronzoni and P. Decleva,  
"A comparative photoionization study of sulfur L levels in the SF<sub>5</sub>CF<sub>3</sub> and SF<sub>6</sub> molecules",  
IPW, Uppsala, 15-19.06.2008

M. Stener, P. Decleva and G. Fronzoni,  
"Response effects in photoemission of transition metal compounds by TDDFT"  
The first Meeting of the COST Action CM0702: Chemistry with Ultrashort Pulses and Free-Electron Lasers: Looking for Control Strategies Through "Exact" Computations (CUSPFEL), Bordeaux (France) 16 - 17 October 2008

P. Decleva,  
"Photoionization: Theory and computation",  
Gordon Research Conference: "Photoions, Photoionization & Photodetachment", January 27 - February 1, 2008, Il Ciocco Hotel and Resort, Barga (Lucca), Italy

S. Coriani,  
"Challenging the limits of the quantum-chemical modelling of molecular response properties".  
Invited seminar. March 11, 2008. Lille Auditorium (B203), Realfag, University of Tromsø, Norway

P. Decleva,  
"DFT and TDDFT Approach To Photoionization Dynamics",  
Stockholm, KTH, Theoretical Chemistry, 22.05.2008, invited talk

P. Decleva,  
"Photoionization dynamics in molecules by DFT and TDDFT approach",  
Dresden, MPIKS, 18.06.2008, invited talk

P. Decleva,  
"B-Splines in molecular structure and dynamics",  
The first Meeting of the COST Action CM0702: Chemistry with Ultrashort Pulses and Free-Electron Lasers: Looking for Control Strategies Through "Exact" Computations (CUSPFEL), Bordeaux (France) 16 - 17 October 2008

S. Coriani,  
"In silico determination of magnetic circular dichroism parameters and spectra" (invited talk),  
Trends in quantum chemistry. A meeting for the future purposes and methods. Lundbeck Foundation Centre  
for Theoretical Chemistry at Aarhus University, Denmark December 12-14, 2008

S. Coriani,  
"In silico determination of magnetic circular dichroism parameters and spectra"  
Winter Modelling 2008, Pisa, December 19, 2008, invited talk.

P. Decleva,  
"Molecules in Strong Field: Lasers, FELS and all that",  
Winter Modelling 2008, Pisa, 19<sup>th</sup> December 2008, invited seminar.

Sabina Licen, Massimo Fregonese, Paolo Tecilla,  
"Peptide-Based Artificial Ionophores: Conduction Studies",  
Winter School of Physical Organic Chemistry – Bressanone (BZ) , 27 gennaio-1 febbraio 2008,  
comunicazione poster

M. Muniz-Miranda, B. Pergolese, A. Bigotto,  
SERS spectroscopy of 4-dimethylamino,4'-nitrostilbene adsorbed on silver colloidal nanoparticles:  
XXI International Conference on Raman Spectroscopy (ICORS), London, 17-22 Agosto 2008,  
comunicazione poster

M. Muniz-Miranda, B. Pergolese, A. Bigotto,  
Study of the adsorption of 2-mercaptobenzoxazole on gold colloidal nanoparticles by means of Surface  
Enhanced Raman Scattering Spectroscopy,  
XXIX European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS), Opatija (Croatia), 31 Agosto-5  
Settembre 2008, comunicazione poster

M. Muniz-Miranda, B. Pergolese, A. Bigotto,  
SERS and DFT investigation on the adsorption of 1,10-phenanthroline on transition metal surfaces,  
XX Congresso GNSR (Gruppo Nazionale Spettroscopia Raman ed Effetti Non-lineari), Milano, 10-13  
febbraio 2009, comunicazione orale

S. Monari, A. Ranieri, G. Di Rocco, M. Borsari, S. Peressini, C. Tavagnacco, D. Millo and G. van der Zwan  
Electrochemical and Spectroscopic Characterization of the Urea Induced Unfolding of Cytochrome c  
Adsorbed on Self-Assembled Monolayer:  
Giornate dell'elettrochimica italiana, GEI ERA 2008, Genova, 15 - 20 Giugno 2008, comunicazione

S. Monari, A. Ranieri, G. Di Rocco, G. van der Zwan, S. Peressini, C. Tavagnacco, D. Millo, M. Borsari  
Electrochemical and Spectroscopic Characterization of the Urea Induced Unfolding of Cytochrome c  
Adsorbed on Self-Assembled Monolayer:  
VIII giornata della chimica dell'Emilia Romagna, Ferrara, 16 dicembre 2008, comunicazione poster

S. Geremia, J. Wuerges, P. Siega, R. Dreos, L. Randaccio, S. N. Fedosov  
"From B<sub>12</sub> transport proteins to vitamin B<sub>12</sub> bioconjugates as diagnostic and therapeutic drugs.",  
Meeting progetto FIRB " Metodologie e Tecnologie innovative per la Farmaceutica" - Lecce, 13-14  
marzo 2008. Comunicazione orale.

L. Randaccio,  
"Transcobalamin and Carlo Pedone.",  
Dalle molecole modello alle macromolecole, Convegno in occasione del 70mo compleanno del Prof.  
Carlo Pedone, Napoli, 12 giugno 2008.

S. Geremia,

“From structural biology to supramolecular chemistry”

1st SIMC-AIC Joint Meeting Sestri Levante (GE) 7-12 Settembre 2008, Presentazione Orale:

Ennio Zangrando, Elisabetta Iengo, Massimo Casanova, Enzo Alessio,

Synthetic Strategies and Structural Aspects of Metal-Mediated Multi-Porphyrin Assemblies.

Poster, XXI Congresso Internazionale di Cristallografia, Osaka, 23-31 agosto 2008

Diego Montagner, Bruno Longato, Ennio Zangrando, Alfonso Venzo,

“Synthesis and characterisation of new azametallacycle complexes formed by insertion of nitriles into Pt(II)-nucleobase bonds”,

8th Workshop on Pharmaco Bio-Metallics Ravenna, 24 - 26 Ottobre 2008. Comunicazione poster.

L. Randaccio,

“From B<sub>12</sub> transport proteins to vitamin B<sub>12</sub> bio-conjugates as diagnostics and therapeutic drugs. “

Seminario per invito presso il CERM, Università di Firenze, 23-9-2008.

E. Zangrando,

"Metallacycles of Porphyrins as Building Blocks in the Construction of Higher Order Assemblies",

Global COE & IREMC International Meeting on “Molecular science for future materials and complex phenomena”, University of Tohoku (Sendai, Giappone) 22 agosto 2008, Seminario per invito

E. Zangrando,

“Crystal Structures: lattice solvent molecules and interpenetrated networks”,

Istituto Catalano di Ricerca, Tarragona (Spagna) 18 settembre 2008, Seminario per invito.

L. Randaccio

“The crystallography in the chemistry and biochemistry of vitamin B<sub>12</sub>.”

Scuola Nazionale di Chimica Bioinorganica per Dottorandi, Napoli, 14-16 settembre 2008, conferenza su invito

## **ALLEGATO D**

### **Collaborazioni**

- Università degli Studi di Trieste, Dipartimento di Scienze di Medicina Pubblica, Prof. Massimo Bovenzi, Dr.ssa F. Larese
- Università degli Studi di Trieste, Dipartimento di Ingegneria Civile e Ambientale (Prof. V. Armenio)
- Università degli Studi di Trieste, Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, Prof. M. Prato; Dr.M.Zacchigna
- Università degli Studi di Trieste, Dip. Sc. della Vita, Prof. R. Marzari, Prof. A. Tossi.
- Università degli Studi di Udine, Dipartimento di Scienze Agrarie e Ambientali (Prof. R. Chiumenti; Prof. M. De Nobili)
- Università degli Studi di Udine, Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche, Prof. A. Trovarelli; Dr.C.Comuzzi; Prof. P. Rigo; Prof. W. Baratta
- Università degli Studi di Udine, Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biomediche, Prof. L.Xodo; Prof. C. Brancolini.
- Università di Torino, Laboratorio di Igiene Industriale, Prof. G. Maina
- Regione Autonoma Friuli Venezia Giulia – Centro Regionale di Catalogazione e Restauro dei Beni Culturali, Dr. A. Giacomello
- CNR - I.S.MAR., Istituto di Scienze Marine -Sezione di Trieste-, Dott. Stefano Cozzi
- Agenzia Regionale per la Protezione dell’Ambiente del Friuli Venezia Giulia (Dott. I.Pellegrini)
- Agenzia Regionale per la Protezione dell’Ambiente del Veneto (Dr. A.Latella)
- Consiglio Nazionale delle Ricerche, Istituto per Inquinamento Atmosferico (Dott. A. Febo)
- FAI Instruments s.r.l. (Dott. A.C. Imperatore)
- Istituto Superiore per Protezione e la Ricerca Ambientale, Servizio di Metrologia Ambientale (Dr. D. Centioli)
- Politecnico di Milano, Dipartimento di Ingegneria Idraulica, Ambientale, Infrastrutture Viarie, Rilevamento (Prof. S. Cernuschi)
- SRA Instruments s.r.l. (Dott. A. Miliazza)
- Università degli Studi di Bari, Dipartimento di Chimica (Dr. G. de Gennaro)
- Università Cattolica del Sacro Cuore di Brescia, Dipartimento di Matematica e Fisica (Prof. A. Ballarin Denti)
- Università degli Studi di Chieti, Facoltà di Psicologia (Dr. A. Mazzatenta)
- Università degli Studi di Parma, Dipartimento di Scienze Ambientali (Prof. G. De Leo)
- Università degli Studi di Pisa, Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale (Prof. M.P. Colombini)
- Prof. F. Gianturco, Università di Roma "La Sapienza"
- Dr. T. Prosperi, Istituto di Struttura della Materia (ISM), Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR), Roma
- Prof. V. Barone, Scuola Normale Superiore, Pisa.
- Dott. L. Avaldi, CNR-Istituto di Metodologie Inorganiche e dei Plasmi, Area della Ricerca di Roma 1 (Monterotondo)
- Dr. A. Rizzo, Istituto per i Processi Chimico-Fisici del CNR, Pisa
- Dr. C. Cappelli, Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale, Università di Pisa
- Dr. Maurizio Muniz-Miranda (Dipartimento di chimica dell’Università di Firenze).
- Advances technologies and nanoScience Laboratory (TASC), G. Comelli
- Università di Cagliari, Dipartimento di chimica Inorganica ed Analitica, P. Deplano
- Università di Verona, Dipartimento Scientifico e Tecnologico, M. Bettinelli
- Istituto Chimica dei Composti OrganoMetallici CNR, C. Bianchini
- Università di Messina, Dipartimento di Chimica Industriale e Ingegneria dei Materiali, S. Perathoner
- Università Ca' Foscari di Venezia, Dipartimento di Chimica Fisica, A. Benedetti
- Istituto Struttura della Materia, CNR (Dr. C. Crotti).
- Università di Modena, Dipartimento di Chimica, Prof. M. Borsari
- Università di Padova, Dipartimento di Scienze Chimiche, Prof. U. Tonellato; Prof. P. Scrimin
- Università di Padova, Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, Prof. M. Palumbo

- Università di Salerno, Dipartimento di Chimica, Prof. F. De Riccardis
  - Università “Federico II” di Napoli, Dipartimento di Chimica Organica e Biochimica, Prof. D. Montesarchio
  - Università di Parma, Dipartimento di Chimica Organica e Industriale, Prof. A. Casnati
  - Dipartimento di Chimica Organica, Università di Bologna, Prof. M. Lucarini.
  - Dipartimento di Chimica Fisica, Laboratorio di Microscopia Elettronica, Università di Venezia, Prof. S. Polizzi.
  - Università di Torino (Prof. F. Boccuzzi, S. Coluccia)
  - Biosensor Technologies s.r.l. Trieste, Dr. A. Savoini.
  - Università del Piemonte Orientale, Dip. Scienze Mediche, Prof. D. Sblattero.
- 
- Jozef Stefan Institute di Lubiana (Slo), Dept. of Environmental Sciences (Dr. B. Smodis)
  - Pomeranian Academy (Pl), Biology and Environmental Protection Institute (Dr. A. Astel)
  - *Studium Biblicum Franciscanum* di Gerusalemme (Il), (Prof. S. De Luca)
  - Università di Sofia “St. Kliment Ohridski” (Bg), Chair of Analytical Chemistry, (Prof. V. Simeonov)
  - Prof. A. Yagishita, Photon Factory, Institute of Material Structure Science, KEK, Tsukuba-shi, Ibaraki 305-0801, Japan
  - Dr. D. Holland, Daresbury Laboratory, Daresbury, Warrington, Cheshire WA4 4AD, UK
  - Prof. R. R. Lucchese, Texas A&M University, College Station, Texas, USA.
  - Dr. D. Toffoli, Middle East Technical University, Ankara, Turkey.
  - Prof. P. Jørgensen, Dr. T. Kjaergaard, Dr. K. Kristensen. The Lundbeck Foundation Center for Theoretical Chemistry, Department of Chemistry, University of Aarhus, Denmark
  - Prof. T. Helgaker, Dr. A.M. Teale. Centre for Theoretical and Computational Chemistry, Department of Chemistry, University of Oslo, Norvegia
  - Prof. K. Ruud, Dr. H. Solheim, Dr. A.J. Thorvaldsen, D. Shcherbin. Centre for Theoretical and Computational Chemistry, Department of Chemistry, University of Tromsø, Norway
  - Dr. P. Norman, Department of Physics, Chemistry and Biology, Linköping University, Sweden
  - Prof. K. Ueda, Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University, Sendai 980-8577, Japan
  - Prof. A. Saenz, Humboldt University of Berlin.
  - Dott. A. Kivimäki, CNR-INFN, Laboratorio Nazionale TASC, 34012 Trieste, Italy
  - University of Pennsylvania, Department of Chemical and Biomolecular Engineering, R. J. Gorte
  - Centro Atomico Bariloche, F. Gennari
  - Università di Aarhus (DK) Prof. Fedosov
  - Department of Materials, Imperial College London, UK, Dr. M. M. Stevens.
  - Materials Science Centre, University of Groningen, The Netherlands, Prof. P. Rudolf.
  - Università di Cadice (Spagna) (Prof. S. Bernal, Prof. J. Calvino)
  - Università di Belfast (GB) (Prof. R. Burch).
  - National Center of Infectious Diseases. Sofia. Bulgaria, Prof. R. Argirova.

**ALLEGATO E**  
**Seminari tenuti presso il Dipartimento**

24.01.08

Prof. N. R. Thomas, Centre for Biomolecular Sciences, School of Chemistry, University of Nottingham, UK.

White plagues & green reactions – Synthesis and evaluation of microbacterial cell wall biosynthesis inhibitors & fluoruous biphasic biocatalysis

30.01.08

Dr. A. M. Teale, Centre for theoretical and computational chemistry, Department of Chemistry, Oslo University, Norway

Optimized effective potentials and constrained search procedures in DFT

03.03.08

Prof. M. Yoshizawa, Department of Applied Chemistry, Graduate School of Engineering, The University of Tokyo, Tokyo, Japan

Functional cavities within self-assembly coordination cages

14.03.08

Prof. F. Pichierri, The Tohoku University, Sendai, Japan

Allilazione di aldeidi e immine catalizzata da complessi organometallici di palladio: studio computazionale del meccanismo di reazione usando metodi del funzionale di densità (DFT)

26.03.08

Dott. G. Vicario, Elcrom, Udine

Vernici: chimiche applicate

04.04.08

Prof. V. Cortes, Instituto de Catalisis y Petrolquímica, CSIC, Madrid, Spagna

Oxidative dehydrogenation of alkanes over nanostructured oxides.

21.04.08

Dott. M. Comotti, Acta S.p.A., Pisa

Nanomaterials in catalysis: problems and possible solutions

04.06.08

Dott. S. Furlan, Istituto di Chimica dei Composti Organo-Metallici (ICCOM – CNR), Sesto Fiorentino, Firenze

Simulazione al computer di siti di legame metallo-proteina in domini non strutturati: il caso delle proteine coinvolte nelle malattie neuro-degenerative

25.06.08

Dott. F. Colombo, Dipartimento di Scienze Chimiche, Università di Trieste, Trieste

Prosecco e proseccchi: miti e leggende nella viticoltura del Triveneto

03.07.08

Prof. R. Schibli, Paul Scherrer Institute, Center for Radiopharmaceutical Science, OIPA, Villigen PSI, Svizzera

Targeting of cancerous diseases with radioactive vitamin derivatives

28.07.08

Dott. K. Chakrabarty, Department of Chemistry, Visva-Bharati, Santiniketan-731235, India

Enzymatic resolution of methylenolactocin methyl ester

04.09.08

Prof. P. S. Pregosin, Laboratorium für Anorganische Chemie, Politecnico Federlae (ETH), Zurigo, Svizzera

15.09.08

Prof. M. Albrecht, Department of Chemistry, University of Fribourg, Friburgo, Svizzera  
Transition metal chemistry with N-heterocyclic carbenes beyond classical avenues

17.12.08

Dott. P. Finetti, Dipartimento di Scienze Chimiche, Università di Firenze, Firenze  
X-ray absorption spectroscopy of dimensional solid systems and of molecular systems: ultrathin titanium oxide films and organometallic Fe compounds

### **Organizzazione di Congressi**

A. Rizzo, C. Cappelli, S. Coriani, B. Mennucci, S. Monti.

The XIV European Seminar on Computational Method sin Quantum Chemistry (ESCMQC)",

Isola d'Elba, October 2-6, 2008 ([http://h2.ipcf.cnr.it/rizzo/AR\\_ESCMQC.html](http://h2.ipcf.cnr.it/rizzo/AR_ESCMQC.html))

A. Bandiera, P. Barbieri (coordinatore), G. Catalano, S. Cozzutto, C. De Vittor, C. della Torre, L. Di Monte, J. Kašpar, F. Lo Coco, P. Plossi, S. Predonzani, P. Sist, R. Urbani.

XI Congresso Nazionale della Divisione di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali della Società Chimica Italiana "*Dalla conoscenza alle strategie di intervento*" Muggia – Trieste 16-20 giugno 2008 (<http://www.dschi.units.it/sciabc2008/>) !

## **Allegato F**

### **Attività di promozione e orientamento**

#### **1. Seminari tematici:**

##### **Il virus HIV e i suoi punti deboli.** (Dr. F. Berti);

Presso il Dipartimento di Scienze Chimiche:

27/2/2008, circa 60 studenti dell'Istituto Tecnico Torricelli di Maniago, 27/3/2008: circa 30 studenti dell'ITG Pacassi Gorizia

28/3/2008: circa 20 studenti del Liceo Scientifico XXV aprile di Portogruaro

19/5/2008: circa 20 studenti dell'Ancorca Liceo di Portogruaro

Presso gli istituti:

Liceo Oberdan Trieste (01/02/2008), circa 30 studenti;

Liceo Stellini Udine (05/02/2008), circa 60 studenti;

Liceo Pedagogico San Pietro al Natisone (14/02/2008), circa 90 studenti;

Liceo Classico Paolo Diacono Cividale (14/2/2008) circa 30 studenti;

##### **Le nanotecnologie.** (Prof. M. Stener);

Presso il Dipartimento di Scienze Chimiche

27/2/2008, circa 20 studenti dell'Istituto Tecnico Torricelli di Maniago.

Presso il:

Liceo Scientifico Grigoletti di Pordenone (4/4/2008), 70 studenti

##### **La chiralità in natura** (Prof. Patrizia Nitti);

Presso il:

Liceo Scientifico Oberdan di Trieste (30/1/08), circa 15 studenti

##### **Composti antitumorali inorganici** (Prof. E. Alessio);

Presso gli istituti:

Liceo Scientifico Oberdan di Trieste (29/1/08), circa 20 studenti di classi IV e III;

Liceo Scientifico Stellini di Udine (21/02/8), circa 20 studenti;

ITAS D'Annunzio, Gorizia (26/3/08) 2 classi (una IV ed una V);

##### **Le pile: breve storia, innovazioni e riciclaggio.** (Dr. C. Tavagnacco)

Presso gli istituti:

Liceo Scientifico G. Oberdan, Trieste, (2.2.08), 15 studenti;

ITAS D'Annunzio, Gorizia, (27.3.08), 20 studenti;

ITAS D'Annunzio, Gorizia, (8.4.08), 18 studenti;

Liceo Scientifico G. Galilei, Trieste, (19.05.08), 31 studenti

##### **I cristalli liquidi** (Dr. F. Asaro)

Presso gli istituti:

Liceo Scientifico G. Oberdan, Trieste, 28.02.2008, circa 40 studenti

Istituto d'Arte Max Fabiani, Gorizia, aprile 2008, circa 40 studenti.

#### **2. Stage:**

Gli stage sono stati svolti presso i laboratori del Dipartimento di Scienze Chimiche.

##### **Semplici esperienze d'analisi elettrochimiche** (Dr. C. Tavagnacco)

4 studenti del Liceo Scientifico G. Oberdan, Trieste. (05.05.08)

##### **Biotrasformazioni in chimica organica: il caso del lievito da panettiere** (Prof. Patrizia Nitti) (19/02/08)

7 studenti dell'istituto Liceo Grigoletti di Pordenone

1 studenti dell'istituto Liceo Buonarroti di Monfalcone

1 studenti dell'istituto Liceo Paolo Diacono di Cividale

##### **L'analisi ai raggi X dei cristalli: piccole molecole e proteine in 3D.** (Prof. E. Zangrando),

12 studenti del Liceo Scientifico Galilei di Trieste.

3 studentesse dell' IPSIA J. Stefan di Trieste, (Laura Vinci, Alenka Goruppi e Martina Starec), hanno svolto un tirocinio teorico e sperimentale sui seguenti temi:

**Tecniche analitiche e spettroscopiche in chimica organica:**

Cromatografia (Prof. P.Nitti); 10 ore; Spettroscopia UV-VIS (Prof. F.Felluga); 10 ore; Spettroscopia NMR, (prof. C.Forzato), 10 ore, 2)

**Utilizzo di idrolasi** per la risoluzione cinetica enzimatica di esteri racemi (Prof. P.Nitti) 20 ore

**Processi sostenibili per la produzione di energia e la degradazione di inquinanti:**

Fotocatalisi: inquinanti e idrogeno (Dr V.Gombac) 7 ore; Catalizzatori eterogenei per l'abbattimento di inquinanti gassosi (Dott. T. Montini) 7 ore; Celle a combustibile (dr.M.Bevilacqua), 7 ore.

La sig.na Martina Starec ha frequentato uno stage su **Chimica computazionale: determinazione al calcolatore di struttura ed energetica molecolare**" (Prof. P.Decleva), 60 ore.

La sig.na Martina Starec ha frequentato uno stage su: **Determinazione strutturale ai RX di piccole molecole** (Prof. E.Zangrando), 1/9/2008-4/10/2008.

La sig.na Laura Vinci ha frequentato uno stage su **attività aldolica delle sieralbumine** (Dr.Federico Berti), 10/6 – 10/7/08, con diffuso utilizzo della tecnica HPLC e **sintesi di piccoli peptidi** (Dr.Federico Berti), 1-30/9/2008

Infine, è stata svolta da una studentessa (Marina Curać) dello **United World College of Adriatic** una tesina sperimentale intitolata

“Study in stereochemistry”, per un totale di 20 ore, sotto la supervisione della Prof. Patrizia Nitti.

### **3. Laboratorio permanente**

Le esperienze del Laboratorio Permanente sono state svolte presso i laboratori del Dipartimento di Scienze Chimiche.

**Ciclo del rame** (Proff. Enzo Alessio e Barbara Milani)

17.04.08: alcuni studenti di una classe IV del Liceo Scientifico Marinelli di Udine;

15.05.08: 7 studenti classe IV Liceo Scientifico Galilei;

16.05.08: 15 studenti classe IV Liceo Scientifico Galilei;

**Sintesi dell'Aspirina (acido acetilsalicilico)** (Prof. Fulvia Felluga)

16.01.2008 per la Prof. Daniela Carini, insegnante del Liceo Scientifico Marinelli di Udine,

**Determinazione del contenuto di Vitamina C nei succhi di frutta** (Prof. Fulvia Felluga)

16.01.2008 per la Prof. Daniela Carini, insegnante del Liceo scientifico Marinelli di Udine.

**Separazione dei pigmenti con cromatografia su strato sottile** (Prof. Fulvia Felluga).

16.01.2008 per la Prof. Daniela Carini, insegnante del Liceo scientifico Marinelli di Udine,

**Voltmetro di Hoffmann, pila Daniell, effetto Volta, pila a vegetali.** (dr. C.Tavagnacco)

19.05.2008, 17 studenti Liceo Scientifico Galilei di Trieste;

**Titolazioni potenziometriche e conduttimetriche** (Dr.G.Balducci)

28.02.2008 14 studenti dell'ITG Pacassi di Gorizia;

17.04.2008 16 studenti del Liceo Scientifico Marinelli di Udine;

**Esperienze di Cromatografia** (Prof. F.Felluga)

17.04.2008, 8 studenti del Liceo Scientifico Marinelli di Udine;

**Determinazione di un calore di combustione** (Prof. R.Dreos, dr. P.Siega)

27.03.2008 20 studenti della Scuola: ITAS D'Annunzio di Gorizia;

17.04.2008, 7 studenti del Liceo Scientifico Marinelli di Udine;

**Determinazione della concentrazione di specie in soluzione per via spettrofotometrica** (dr. G.Balducci, Prof. F.Felluga)

14.04.2008, circa 40 studenti dell'ISIS V.Manzini di S.Daniele;

16.04.2008, 16 studenti del Liceo Scientifico Galilei di Trieste;

#### **4. Visite guidate al Dipartimento di Scienze Chimiche**

Gli studenti che hanno partecipato agli **stage**, al **Laboratorio Permanente**, e ai **seminari tematici** presentati presso il Dipartimento di Scienze Chimiche, hanno visitato anche i laboratori di ricerca del Dipartimento e i Laboratori Grandi Strumentazioni, come il Laboratorio Raggi X e il Laboratorio NMR. Anche studenti del Collegio del Mondo Unito dell'Adriatico hanno effettuato visite al Dipartimento, con particolare interesse verso strumenti come IR, NMR, HPLC, GC.

#### **5. Chem-Show**

Le iniziative "ChemShow" ed "Avvicinare i Giovani alle Scienze Chimiche", coordinate e gestite dai Dott. Sonia Coriani e Claudio Tavagnacco, hanno l'obiettivo di offrire agli alunni delle Scuole d'ogni ordine e grado della Regione Friuli Venezia Giulia un contatto diretto con la chimica proponendo esperienze chimiche divertenti e spettacolari.

Le attività si sono svolte con modalità 'itinerante', cioè direttamente presso le scuole che ne hanno fatto richiesta. Sono state coinvolte le seguenti scuole:

- ITG "Marinoni" di Udine - 2 interventi in data 07/02/2008 e 11/11/2008, 150 studenti partecipanti;
- Liceo Linguistico di San Pietro al Natisone (UD) - 1 intervento in data 19/2/2008, 50 studenti;
- ITS Galilei, Trieste - 1 intervento in data 03/04/2008, 25 studenti;
- Scuola media di Treviso in data 08/05/2008 in visita presso UTS, 80 studenti.

Inoltre, nella giornata del 23 ottobre 2008 lo show è stato presentato nell'ambito dell'iniziativa "*Giocchi di Scienza*" organizzata dal Comune di Muggia per i bambini delle scuole elementari e dell'infanzia di tale comune. Vi hanno partecipato approssimativamente 400 bambini.