

## 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 cutanea e studi sull'assorbimento di nanoparticelle metalliche.** Questa tematica di ricerca riguarda lo studio dell'assorbimento cutaneo in-vitro di sostanze tossiche. Per i test di permeazione viene utilizzato il metodo delle celle di diffusione di Franz. Il progetto, iniziato con la valutazione di sostanze organiche, si è poi spostato sulle polveri metalliche. Nel 2009 è stata focalizzata l'attenzione sull'indagine della penetrazione cutanea di nanoparticelle metalliche (Ag, Au, Ni), visto il crescente interesse per i molti campi di applicazione delle nanotecnologie. Uno studio importante riguarda la penetrazione della nanoparticelle come tali nello strato cutaneo. Le tecniche analitiche di indagine utilizzate sono: spettroscopia di assorbimento atomico (ETAAS), spettroscopia UV-vis, spettroscopia di emissione atomica (ICP-AES), tecniche elettrochimiche, microscopia elettronica a trasmissione (TEM), microtomografia a raggi X alla luce di sincrotrone (SYRMEP beamline).

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

FINANZIAMENTI: MIUR-PRIN 2006, 48.600 €, assegnato nel 2007, durata: 2 anni.

PUBBLICAZIONI: 3

**Tecniche analitiche innovative per lo studio degli inquinanti nel particolato atmosferico.** Il particolato atmosferico (PM<sub>10</sub> e PM<sub>2,5</sub>) è una matrice ambientale molto complessa e dunque, oltre al semplice monitoraggio della sua concentrazione nell'aria è importante anche la sua caratterizzazione chimica per individuare e quantificare il contenuto di elementi o composti chimici potenzialmente dannosi per la salute umana. Parte di questa ricerca è focalizzata su due siti della provincia di Trieste: uno urbano-industriale ed uno costiero. I dati relativi al PM e alla sua composizione sono stati impiegati per sviluppare un modello a recettore che ha permesso di individuare e quantificare le possibili sorgenti. Si è inoltre implementata una tecnica innovativa per la determinazione della granulometria del particolato, basata su metodi di analisi delle immagini. La tecnica usata è stata la spettroscopia di micro-fluorescenza a raggi X con luce di sincrotrone (micro-SRXRF) e le misure sono state eseguite sulla beamline ID-21 dell'European Synchrotron Radiation Facility di Grenoble (Francia).

PARTECIPANTI: Prof. G. Adami, Prof. E. Reisenhofer, Dr. P. Barbieri

PUBBLICAZIONI: 4

**Sviluppo di nuovi sistemi di sverniciatura chimica con solventi non tossici.** Il progetto è iniziato nel 2007 su richiesta di alcune imprese regionali di restauratori di beni culturali. Il gruppo di lavoro è formato da Università di Trieste, AREA di ricerca di Trieste e Regione Friuli Venezia Giulia. Nel 2008, nell'ambito del "Progetto SISTER", è stato avviato l'intervento di convalida che consisteva nella caratterizzazione delle prestazioni di un prototipo di un nuovo sistema di sverniciatura, con l'utilizzo di un prodotto sverniciante con caratteristiche di ridotta tossicità, buona applicabilità ed efficacia a base di dimetilsolfossido e limonene applicato su strisce assorbenti e coprenti. Nel 2009 è stato depositato il brevetto nazionale e sono stati svolti i test di verifica in collaborazione con diverse aziende del settore.

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

FINANZIAMENTI: Regione Friuli Venezia Giulia-Progetto Sister (Area di Ricerca di Trieste), 24.000 €, assegnato nel 2008, durata: 1 anno

PUBBLICAZIONI: 1

**La chimica analitica per lo studio dei beni culturali librari e cartacei.** Nell'ambito dei rapporti di collaborazione tra il Dipartimento di Scienze Chimiche dell'Università degli Studi di Trieste ed il Centro Regionale di Catalogazione e Restauro dei Beni Culturali della Regione Autonoma Friuli Venezia Giulia nel 2009 sono stati avviati due progetti di ricerca per lo studio dei beni culturali librari e cartacei: uno riguarda la determinazione del pH superficiale della carta da misurarsi per contatto con microelettrodi di nuova

generazione, l'altro lo studio dei processi di degradazione chimica e dei possibili rimedi conservativi nelle attività di restauro relative alla rimozione dei nastri adesivi da stampe, libri e manufatti cartacei.

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

**Particolato atmosferico e composti organici volatili: sviluppo di metodi analitici, modellazione di sorgenti emissive e dispersione in atmosfera.** L'attività riguarda la caratterizzazione di particolato atmosferico e composti volatili nell'aria ambiente, indoor e in prossimità di realtà industriali. Vengono sviluppati metodi analitici, di campionamento e modelli di dispersione per contaminanti atmosferici ed in particolare per microinquinanti organici. Si effettuano valutazioni e ottimizzazioni di tecnologie di mitigazione di emissioni da flussi convogliati.

PARTECIPANTI: Pierluigi Barbieri (RU CHIM/12), Dott. Chim. Sergio Cozzutto (Dottorando) Luca Di Monte Ph.D. (Dottorando, borsista), Federico Cozzi (Borsista), Massimo Casanova Ph.D. (Borsista), Gianpiero Barbieri (Studio ospite), Sabina Licen (Studio ospite)

FINANZIAMENTI: Sincrotrone Trieste, "Monitoraggio Ambientale Distribuito Basato su reti a Grid: MADBAG" subcontratto su finanziamento Regione FVG, 40000 €, 2009, 10 mesi; Lenviros srl "Ottimizzazione di metodiche olfattometriche per la determinazione delle emissioni osmogene", subcontratto su Programma Operativo Regionale Puglia, 22000 €, 2009, 12 mesi; Eukrasia srl "Dossier Energia da Biomassa: emissioni in atmosfera", ricerca con committenza privata, 16000 €, 2008, 10 mesi; Nuova Romano Bolzicco srl "Studio sulla qualità dell'aria in prossimità dell'inceneritore di Manzano" ricerca con committenza privata, 66000 €, 2009, sei mesi; SRA Instruments "Messa a punto di una metodologia DTD-GC-MS automatizzata per la determinazione di IPA su filtri di particolato atmosferico", collaborazione scientifica, strumentazione, 2009; FAI instruments, "Campionamento di IPA su filtri in campionatori sequenziali per PM: artefatti e impiego di *denuders*" collaborazione scientifica, strumentazione, 2009.

PUBBLICAZIONI: 1

**Siti contaminati: sviluppo di metodi integrati di caratterizzazione e studi sulla rizodegradazione di inquinanti organici.** Linee di ricerca attive su: contaminazione di suoli e corpi idrici, modellazione del rischio sanitario ed ecologico in siti contaminati, bioaccumulo di microinquinanti in gasteropodi terrestri, metodi di progettazione e validazione sito-specifica di impianti di fitorimediazione (es. rizodegradazione di contaminanti organici, barriere verdi per inquinanti aerodispersi).

PARTECIPANTI: Pierluigi Barbieri (RU CHIM/12), Luca Di Monte (dottorando, borsista), Chiara Della Torre (dottoranda), Giulia Pignolo (dottoranda), Michela Sesso (dottoranda), Obaseki Olubunmi (dottoranda, studiosa ospite), Federico Cozzi (borsista)

FINANZIAMENTI: Provincia di Trieste, cofinanziamento borse di dottorato, 2007, 36000 €, 36 mesi; Università di Trieste Fondo Giovani "Biomonitoraggio con gasteropodi terrestri" 4000 €, 2008, 12 mesi; Cooperativa Agricola Monte San Pantaleone, "Ricerca e sviluppo su metodi di fitorimediazione per" 24000 €, 2008, 36 mesi; ICTP "Assessing the effect of green barriers on air dispersed metal contaminants from traffic sources" 1500 €, 2009, 3 mesi; DSCh, fondi da attività conto terzi.

PUBBLICAZIONI: 1

**Valutazioni di sostenibilità.** Si studiano metodi e procedure per valutazioni di sostenibilità di processi e prodotti (*carbon footprint*) e per l'implementazione del regolamento 1907/2006/CE (R.E.A.Ch.)

PARTECIPANTI: Pierluigi Barbieri, Chiara Della Torre (dottoranda), Massimo Casanova PhD (borsista)

FINANZIAMENTI: DSCh, fondi da attività conto terzi

PUBBLICAZIONI: 1

**Archeometria.** Studio archeometrico con radiografie e tecniche spettrometriche non distruttive (XRF, micro-Raman) su reperti metallici antichi ("Signum Sancti Sergii de Trigesto")

PARTECIPANTI: Pierluigi Barbieri (RU CHIM/12), Mirta Sibilìa (laureanda), Federico Cozzi (borsista)

FINANZIAMENTI: Wartsila spa, sostegno all'elaborazione di un lavoro di tesi, 500 €, 2009, 12 mesi

## SPETTROSCOPIA MOLECOLARE

**Caratterizzazione strutturale e spettroscopica di sistemi molecolari complessi.** Determinazione delle conformazioni geometriche preferite in fase gassosa e soluzione di composti eteropolimerici di corrente interesse biologico mediante calcoli accurati DFT. Interpretazione della struttura elettronica mediante studi teorici delle proprietà acide e delle principali manifestazioni spettroscopiche.

PARTECIPANTI: prof. V. Galasso e collaboratore straniero.

PUBBLICAZIONI: 2.

**Studio SERS dell' interazione di molecole con superfici metalliche.** Preparazione di substrati SERS-attivi mono- e bimetallici e studio dell' effetto del drogaggio sull' efficienza SERS. Interpretazione degli spettri SERS mediante calcoli DFT su modelli di addotti molecola-superficie metallica. Studio, mediante spettroscopia Raman, dell' effetto del trattamento meccanico sulla cristallinità dei principi attivi nelle preparazioni farmaceutiche.

PARTECIPANTI: prof. Adriano Bigotto, dr.ssa Barbara Pergolese (borsista), dr. Maurizio Muniz-Miranda (Università di Firenze)

PUBBLICAZIONI: 3.

**Indagini mediante spettroscopia NMR multinucleare di struttura e dinamica di soft condensed matter.**

La spettroscopia NMR, in particolare dei nuclei quadrupolari, i cui parametri di rilassamento sono molto utili per ottenere informazioni dinamiche sui sistemi, e la misura dei coefficienti di autodiffusione mediante PGSTE NMR sono stati utilizzati nello studio di vari sistemi costituiti da aggregazioni tensioattivi o da biopolimeri.

Sono stati condotti studi in situ, mediante  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ , PGSTE NMR e spettroscopia IR, sull'effetto del catalizzatore acido nel processo sol-gel in microemulsione inversa per la sintesi di nanoparticelle di silice.

E' stata considerato il problema dell'interazione specifica dei cationi con polielettroliti. Il rilassamento longitudinale del  $^{23}\text{Na}$ , in sinergia con misure di viscosità specifica, calorimetria isoterma e intensità di luce diffusa, ha evidenziato un ordine di affinità del catione  $\text{Mg}^{2+}$  per alginati diversi, che risulta essere poliguluronano > polialternato (M-G) > polimannuronano.

La spettroscopia NMR di  $^1\text{H}$ ,  $^{14}\text{N}$ ,  $^{23}\text{Na}$ ,  $^{81}\text{Br}$  ha permesso di stabilire la struttura ed avere informazioni sulla dinamica a livello molecolare delle diverse forme di self-assembly presenti all'interno dell'estesa regione monofasica ( $L_1$ ) del sistema cationico taurodesossicolato di sodio (NaTDC), bromuro didodecildimetilammonio (DDAB) con  $\text{D}_2\text{O}$  come solvente.

PARTECIPANTI: Dott. F. Asaro. Non strutturati: Dott. N. Savko (dottoranda)

PUBBLICAZIONI: 2

## CHIMICA TEORICA

**Fotoionizzazione e fotoassorbimento molecolare.** E' stata effettuata la prima applicazione del metodo TDDFT per il continuo ad un complesso di un metallo di transizione ( $\text{Cr}(\text{CO})_6$ ), che ha permesso lo studio dell'autoionizzazione  $3p \rightarrow 3d$  del metallo. Sono continuati gli studi sul dicroismo circolare in fotoemissione (CDAD) da molecole chirali, e sulla fotoionizzazione molecolare ( $\text{C}_6\text{F}_6$ ). In collaborazione con un gruppo sperimentale giapponese è stata studiata la distribuzione angolare dei fotoelettroni da molecole orientate ( $\text{H}_2\text{O}$ ). E' stato anche intrapreso uno studio per la descrizione di molecole in presenza di impulsi laser ultracorti.

**Proprietà di sistemi estesi e cluster.** E' stato studiato il fotoassorbimento di raggi X della soglia K dello zolfo di  $\text{SO}_2$  adsorbita sulla superficie (110) di  $\text{TiO}_2$  e dei tiolati adsorbiti su una serie di cluster di oro.

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

**Spettroscopia Molecolare.** Caratterizzazione strutturale e spettroscopica di sistemi eterociclici chirali.

Determinazione della conformazioni preferite in fase gassosa e in soluzione di composti di potenziale interesse biologico ed assegnazione della loro configurazione assoluta mediante calcoli DFT.

PARTECIPANTI: Prof. P. Decleva, Prof. G. Fronzoni, Prof. M. Stener, Dott. S. Coriani.

Non strutturati: Dott. R. De Francesco (assegnista post-doc) Dott. A Nardelli (studioso ospite)

PUBBLICAZIONI: 15

FINANZIAMENTI: 1) 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. Scaduto nel corso del 2009. 2) 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. Scaduto nel corso del 2009. 3) COST Action CM0702 : Chemistry with Ultrashort Pulses and Free-Electron Lasers: Looking for Control Strategies Through "Exact" Computations (CUSPFEL)

### CHIMICA INORGANICA E BIO-INORGANICA

Sintesi modulare di sistemi multicromoforici per la conversione di energia solare. Questa linea di ricerca riguarda la sintesi e caratterizzazione strutturale, sia in soluzione che allo stato solido, di sistemi multicromoforici (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. Teresa Gatti (dottoranda Ciclo XXIV).

FINANZIAMENTI.

Reintegration Grant 2008 – 2011 (Dr. E. Iengo): 45.000 euro

Fondazione Beneficentia – Stiftung: 25.000 euro

PUBBLICAZIONI. 1

### 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, vengo studiati in particolare composti di tipo half-sandwich. Composti organometallici "half-sandwich" di Ru(II) di formula generale  $[Ru(\eta^6\text{-arene})(X)(L)]^+$  dove L è un chelante bidentato (tipicamente etilendiammina) ed X è un gruppo uscente anionico (tipicamente cloruro), hanno dimostrato di possedere attività antitumorale *in vitro* su linee cellulari tumorali, anche resistenti al platino, ed *in vivo* verso modelli animali. Dopo aver dimostrato che l'arene può essere sostituito dal legante neutro facciale (*face-capping*) solforato 1,4,7-tritiociclononano ([9]anoS3) senza perdere attività *in vitro* in modo troppo rilevante purché il chelante sia l'etilendiammina, nel II anno di attività sono stati progettati e sintetizzati nuovi composti di Ru(II) di tipo half-sandwich allo scopo di ottenere una più ampia correlazione struttura-attività. In particolare

è stata variata la natura del legante facciale, utilizzando sia il macrociclo azotato 1,4,7-triamminociclononano ([9]anoN<sub>3</sub>, cioè il corrispondente azotato del [9]anoS<sub>3</sub>) che tre leganti monodentati (dmsO) in geometria facciale. 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..

PARTECIPANTI: Prof. Enzo Alessio, Prof. Ennio Zangrando, Dr. Teresa Gianferrara (DSF). Non strutturati: Dr. Ioannis Bratsos (assegnista di ricerca).

FINANZIAMENTI: Fondazione Beneficentia – Stiftung: 25.000 euro. Regione VFG, LR 11/2003, bando 2006: 15.000 euro

PUBBLICAZIONI: 2

**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 oligomerizzazione 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 chirali e chiral. 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. Sono stati condotti degli studi meccanicistici sulla reattività dei complessi usati come precatalizzatori con il monossido di carbonio. Si è inoltre osservato che il sostituito alchilico in posizione 6 del bipiridile non è innocente e a seconda della sua natura può reagire con il palladio dando dei prodotti di ciclometallazione. Diversi complessi sono stati caratterizzati ai Raggi X, avendo così a disposizione una collezione di strutture di una serie omologa che permettono di razionalizzare i parametri strutturali in funzione della natura del legante chelante.

Sono stati anche studiati dei complessi di palladio con leganti carbenici NHC, anche atipici, che si sono dimostrati catalizzatori per reazioni di dimerizzazione di alcheni aromatici.

PARTECIPANTI: Dr. B. Milani – Prof. Ennio Zangrando. Non Strutturati: Dr. Angela D'Amora (Assegnista), Dott. Nicol Guidolin (borsista)

FINANZIAMENTI. PRIN bando 2007, MIUR, 64285 € (comprensivo della quota di cofinanziamento), 2008, biennale.

PUBBLICAZIONI: 2

**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)

PUBBLICAZIONI: 0

FINANZIAMENTI: Marlin S.r.L., finanziamento privato, 50 000 €, 2008, annuale; Marlin S.r.L., finanziamento privato, 17 500 €, 2009, bimestrale.

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

PARTECIPANTI: Erica Farnetti, Nicol Guidolin (borsista)

FINANZIAMENTI: 1) FIRB bando 2006 (vedi fondi J. Kaspar). 2) Donazione della Fondazione Kathleen Foreman Casali (2007) € 13000.

PUBBLICAZIONI: 1

## STRUTTURISTICA CHIMICA.

### **Biocristallografia**

- Studi di catalisi enzimatica in cristalli singoli per indagare il meccanismo catalitico presente nelle fosforilasi.
- Studio finalizzato allo sviluppo di bioconiugati della B<sub>12</sub>, come diagnostici e terapeutici per le cellule tumorali.
- Determinazione della struttura di mutanti di proteasi HIV resistenti ai farmaci attualmente utilizzati mediante diffrazione di raggi-X.
- Espressione, purificazione della fosfodiesterasi umana (famiglia PDE4) e struttura a raggi X di suoi complessi con inibitori.
- Caratterizzazione degli epitopi antigenici presenti nelle proteine del virus dell'epatite C (HCV) e negli anticorpi IgG.

**Calcoli teorici di cobalammine.** In collaborazione con il Prof. P. Kozlowski dell'Università di Louisville (USA) sono stati studiati la *trans* influenza in cobalammine e i relativi spettri UV mediante calcoli DFT.

### **Studi cristallografici di sistemi supramolecolari con cavitandi e porfirine**

PARTECIPANTI. Lucio Randaccio, Silvano Geremia, Rita De Zorzi (assegnista), Nicola Demitri (dottorando), Matteo De Marchi (dottorando)

FINANZIAMENTI.

Progetto FIRB RBNE03PX83. "Folding e aggregazione di proteine: metalli e biomolecole nelle malattie conformazionali" gestito dal C.I.R.C.M.S.B. Scadenza 11/2009. 50.000 €.

Espressione, purificazione della fosfodiesterasi umana (famiglia PDE4) e struttura a raggi X di suoi complessi con inibitori." Contratto con Chiesi Farmaceutici (Parma), 40.000 €.

Progetto PRIN, 2006. "Nanoproteine sintetiche auto assembleate", scadenza 3/2009. 73.500 €

**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, dott.ssa Guidolin Nicol (borsista su progetto PRIN).

FINANZIAMENTI. Vedi Progetto PRIN B. Milani

**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 2009 si sono ottenuti e caratterizzati una serie di cristalli di sistemi supramolecolari, mediante screening automatizzato su larga scala di molecole con funzionalità host, di tipo calixarenico e resorcinarenico, complessate con molecole con funzionalità guest, contenenti gruppi metil-piridinici o alcolici. In particolare, i principali risultati della ricerca hanno riguardato: la funzionalizzazione di cristalli nanoporosi di sistemi supramolecolari a base porfirina/cavitando mediante diffusione di ioni e la caratterizzazione di nuovi polimeri supramolecolari basati sull'interazione host-guest, studio effettuato in collaborazione con il Prof. Dal Canale dell'Università degli Studi di Parma.

PARTECIPANTI: Prof. S. Geremia, Prof. L. Randaccio Non strutturati: Dott. R. De Zorzi (borsista) Dott. N. Demitri (dottorando)

PUBBLICAZIONI: 3

**Progettazione, sintesi e caratterizzazione di derivati bioconiugati della cobalamina quali agenti di contrasto per l'imaging e la somministrazione di farmaci citotossici.** Due derivati bioconiugati della cobalamina sono stati ottenuti sfruttando l'esterificazione del gruppo 5'-OH da parte di molecole dotate di gruppi carbossilici ed esaurientemente caratterizzati in soluzione tramite spettroscopia UV-vis, <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C NMR (1D e 2D), spettrometria di massa ES-MS ed elettroforesi. I derivati bioconiugati sono stati metallati con Gd<sup>3+</sup> e i metalloderivati sono stati caratterizzati in soluzione tramite elettroforesi e ES-

MS. E' stata determinata la struttura allo stato solido del complesso dinucleare derivante dalla cristallizzazione di uno dei bioconiugati in presenza di un eccesso di  $Gd^{3+}$ . E' stata valutata qualitativamente la costante di stabilità del complesso tramite elettroforesi. In collaborazione con il gruppo del Prof. Aime dell'Università di Torino sono state studiate la reazione di idrolisi del legame estereo tramite metodo rilassometrico, per valutare l'effettiva utilizzabilità in vivo del bioconiugato, ed il processo di internalizzazione di CNCbl-DTPAGd e CNCbl-TTHAGd in varie linee cellulari, per valutarne le eventuali caratteristiche antitumorali. In collaborazione con il Prof. Fedeosov dell'università di Aarhus, DK, è stata valutata l'affinità dei bioconiugati nei riguardi della transcobalammina.

PARTECIPANTI: Prof. S. Geremia, Prof. L. Randaccio, Prof. R. Dreos. Non strutturati: Dott.ssa P. Siega (assegnista)  
PUBBLICAZIONI: 1

### **Studi biocristallografici di proteine.**

E' proseguito lo studio strutturale della proteasi HIV e di alcune sue varianti associate alla farmaco resistenza complessate con farmaci e nuovi inibitori. Nel corso del 2009 si sono ottenute le strutture cristalline di alcuni nuovi complessi proteina/inibitore. In particolare, si sono studiati dei nuovi inibitori forniti della Prof.ssa Maria Funicello dell'Università della Basilicata. Questi inibitori sono basati sulla funzionalità sulfonammidica legata ai gruppi anilिनico e sec-butilico connesso con un gruppo indolico. L'immagine del sito attivo ottenuta mediante le tecniche biocristallografiche del complesso enzima/inibitore ha permesso di ottenere importanti informazioni sulle interazioni intermolecolari presenti in questi sistemi. E' continuata la collaborazione con il Centro di Riferimento Oncologico di Aviano nell'ambito dello studio di malattie associate all'infezione di virus HCV che degenerano in linfomi non-Hodgkin che ha portato allo sviluppo di un anticorpo miniaturizzato, MALOT in corso di 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: 1  
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.

## **CHIMICA DEI MATERIALI NANOSTRUTTURATI**

### **Processi sostenibili di 2<sup>a</sup> generazione di produzione H<sub>2</sub> da sorgenti rinnovabili.**

Sviluppo di processi sostenibili per la produzione di idrogeno a partire da materie prime di seconda generazione, quali il glicerolo e zuccheri ottenuti dall'idrolisi di scarti ligno-cellulosici (glucosio). Progettazione e realizzazione di due impianti per lo studio di reazioni di reforming rispettivamente in fase liquida e gassosa. Preparazione, caratterizzazione e test dell'attività di catalizzatori eterogenei in processi di reforming termico e fotocatalitico. Realizzazione di nano compositi di tipo core-shell con innovative proprietà catalitiche.

PARTECIPANTI Paolo Fornasiero, Mauro Graziani, Gabriele Balducci, Tiziano Montini (assegnista), Valentina Gombac (dottoranda di ricerca), Matteo Cargnello (dottoranda di ricerca), Barbara Lorenzut (dottoranda di ricerca), Nicolas Maximilian Bertero (borsista)  
FINANZIAMENTI. MIUR, finanziamento pubblico -PRIN2007, 68.790, 2008, biennale  
PUBBLICAZIONI: 3

### **Nuovi materiali per la produzione e conversione dell'energia e per la protezione dell'ambiente.**

Sviluppo di materiali da impiegarsi nel campo della produzione di energia e della catalisi ambientale. Studio di catalizzatori efficienti per la produzione di H<sub>2</sub> tramite ossidazione parziale del metano, materiali innovativi per SOFC e fotocatalizzatori per la decontaminazione di acque inquinate, con contemporanea produzione di idrogeno. Comprensione dei relativi meccanismi di reazione.

PARTECIPANTI Paolo Fornasiero, Mauro Graziani, Gabriele Balducci, Tiziano Montini (assegnista), Valentina Gombac (dottoranda di ricerca), Matteo Cargnello (dottorando di ricerca), Barbara Lorenzut (dottoranda di ricerca), Nicolas Maximilian Bertero (borsista)  
FINANZIAMENTI. CNR, finanziamento pubblico, 20.000, 2009, annuale ( in aggiunta 60.000 per un dottorato di ricerca 2010-2012, 12.000 cofinanziamento di un dottorato di ricerca 2009-2011)  
PUBBLICAZIONI: 7

**Sviluppo di nanosistemi per la produzione di idrogeno.** Progetto industriale sulla realizzazione di catalizzatori nano strutturati per la produzione di idrogeno da alcoli e attraverso la decomposizione dell'ammoniaca.

PARTECIPANTI. Paolo Fornasiero, Mauro Graziani, Tiziano Montini (assegnista), Barbara Lorenzut (dottoranda di ricerca)

FINANZIAMENTI. IdeaLab, finanziamento industriale, 20.000, 2009, annuale

PUBBLICAZIONI.

I risultati della presente attività sono attualmente confidenziali e di proprietà dell'azienda finanziatrice.

### **Catalisi eterogenea ambientale e nanomateriali**

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

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

FINANZIAMENTI: RINAVE: € 246.500, 2008, triennale; ECOMOS – FIRB: € 185.000, 2008, triennale. APQ Legno € 50.000, 2008, triennale.

PUBBLICAZIONI: 1

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

**Sintesi e caratterizzazione di coniugati misti farmacologicamente attivi supportati a polietilenglicole (PEG) selettivamente modificati. Sintesi e attività di analoghi attivi nella PDT (porfirine e analoghi sintetici), di antibiotici peptidici (Bac) e di proteine antitumorali (TRAIL).** E' stata messa a punto una procedura per l'utilizzo di PEG multifunzionali selettivamente modificati 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 è stato rivolto all'ottenimento di coniugati misti portanti molecole diverse legate allo stesso supporto polimerico. I coniugati ottenuti sono stati caratterizzati e saggiati per le loro proprietà farmacologiche. A tale scopo ha avuto inizio un nuovo studio mirato a tecniche di PDT (terapia fotodinamica) utilizzando PEG-coniugati di sistemi porfirinici. Accanto a questo sono iniziati studi mirati alla coniugazione di peptidi antibiotici (Bac) e proteine antitumorali (TRAIL) al fine di migliorarne le proprietà fotodinamiche e la biodisponibilità.

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

FINANZIAMENTI: PRIN 2007 – Regione Friuli Venezia Giulia 2007

PUBBLICAZIONI: 3

**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 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. Nel continuare il progetto intrapreso l'anno scorso usando tioli amfifilici perfluorurati sono state realizzate nano particelle di oro, solubili in acqua, protette da monostrati misti formati da rapporti diversi di tioli con catena alchilica e tioli con catena per fluorurata. Studi EPR, condotti utilizzando un probe radicalico, hanno messo in evidenza la formazione di domini cioè, si osserva separazione di fase tra tioli perfluorurati e tioli alchilici. L'unicità di queste nano particelle apre ora ad interessanti applicazioni in campo biologico e medico.

PARTECIPANTI: Prof. Lucia Pasquato; Dott.ssa Alice Pace (dottorando).

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

PUBBLICAZIONI: 4

**Nanoparticelle di oro protette da un monostrato organico per la realizzazione di catalizzatori di ossidazione.** In collaborazione con il gruppo del Prof. Fornasiero, nel corso del 2009 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.

PARTECIPANTI: Prof. Lucia Pasquato

**Studio di meccanismi di reazioni usate nella sintesi di molecole di chimica fine.** In collaborazione con ZaCh System del gruppo Zambon è stato studiato il meccanismo di esterificazione di acidi carbossilici in condizioni anidre; è stata affrontata una reazione di ossidazione asimmetrica di un solfuro chirale con l'obiettivo di trovare un processo chemoselettivo, a conversione completa, oltre che diastereoselettivo. Infine, è stato iniziato uno studio preliminare di reazioni di Michael asimmetriche utilizzando tioli come nucleofili.

PARTECIPANTI: Prof. Lucia Pasquato, Dott.ssa Silvia Bidoggia (borsista)

FINANZIAMENTI:

Zambon Group S.p.A.: 30.000 Euro (per il 2009)

PUBBLICAZIONI: Relazioni interne.

**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 2009 l'attenzione è stata maggiormente focalizzata sulla sintesi e studio di ionofori artificiali sia a base peptidica che contenenti calixareni o altri sistemi macrociclici. In particolare con questa ultima classe di composti si è evidenziato un'interessante selettività nei confronti del trasporto di anioni.

PARTECIPANTI: Prof. Paolo Tecilla; Dott.ssa Sabina Licen (borsista), Dott.ssa Mariangela Boccalon (dottorando).

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

PUBBLICAZIONI: 4

**Progettazione, sintesi e reattività di composti enantiomericamente puri, building block per sistemi bioattivi.** Una parte del progetto ha riguardato la sintesi stereoselettiva di  $\alpha$ -metilene- $\gamma$ -lattoni e  $\alpha$ -metilene- $\gamma$ -lattami, che sono stati sintetizzati attraverso risoluzione cinetica enzimatica di substrati contenenti la funzionalità esterea. 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 pirrolidina. 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 spiroirrolidina.

Uno studio condotto su paraconati  $\alpha$ -benzyl e  $\alpha,\alpha$ -dimetil sostituiti utilizzando enzimi purificati ha invece portato all'ottenimento di  $\gamma$ -lattoni  $\alpha$ -funzionalizzati otticamente attivi di cui è stata attribuita la configurazione assoluta anche attraverso estesi studi computazionali.

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

FINANZIAMENTI: PRIN bando 2007: 46080 Euro (comprensivo della quota di cofinanziamento)  
PUBBLICAZIONI: 3

**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).

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

PUBBLICAZIONI: 1

**Peptidomimetici ed inibitori di enzimi.** Il progetto riguarda la messa a punto di nuove metodologie per la sintesi stereoselettiva di isosteri di dipeptidi contenenti più centri stereogenici, e di accettori di Michael, per un utilizzo come building blocks di inibitori peptidomimetici di enzimi. Accanto all'inibizione della proteasi aspartica del virus HIV, tema tradizionale di questo progetto di ricerca, durante il 2009 sono stati considerati anche nuovi enzimi, in particolare la proteasi NS3 del virus Dengue, e l'ubiquitina isopeptidasi tra le trans acilasi, e la reduttasi EACP del plasmodio della malaria. Queste nuove tematiche sono state affrontate in collaborazione con ICS-UNIDO e con il Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biomediche dell'Università di Udine, mentre la tematica HIV è stata sviluppata anche in collaborazione con il Dipartimento di Chimica dell'Università della Basilicata.

PARTECIPANTI: Prof. Fabio Benedetti, Dott. Federico Berti. Non strutturati: Dott. Adrian Ostric (dottorando), Dott. Ulma Cersosimo (dottoranda), Dott. Biswajit Kumar Singh (borsista), Dott. Pankaj Gupta (borsista), Dott. Mlungiselele McDonald Ganto (borsista).

FINANZIAMENTI. Regione Friuli-Venezia Giulia LR 11/2003, bando 2006; Rete Regionale per la Ricerca e Sviluppo di Nuovi Agenti Terapeutici Antiinfettivi. 18.000 Euro

PUBBLICAZIONI: 1

**Piccoli peptidi per lo sviluppo di biosensori.** Il progetto, sviluppato in collaborazione con il Dipartimento di Scienze della Vita, con il gruppo di Fisica Statistica della SISSA, con quello di virologia dell'ICGEB, con T&B associati srl, con la cattedra di Chimica Fisica dell'Università di Lubiana, e con il Dipartimento di Chimica della Queen Mary University of London, riguarda la progettazione, preparazione e caratterizzazione di librerie di piccoli peptidi ad attività recettoriale destinati ad essere utilizzati come trasduttori primari in biosensori, per il rilevamento di xantine e di farmaci usati nella terapia dell'AIDS (efavirenz, darunavir, amprenavir). 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 2009 alcuni bioconiugati della palitossina con enzimi e biotina, ed è stata studiata la stabilità della molecola e di suoi derivati.

PARTECIPANTI. Dott. Federico Berti, Prof. Fabio Benedetti, . Non strutturati: Dott. Giampaolo Fontanive (dottorando), Dott. Silvia Pavan (dottoranda), Dott. Immacolata Luisi (dottoranda), Dott. Rolando Hong Enriquez (borsista), Dott. Paolo Maiuri (borsista).

FINANZIAMENTI. Commissariato del Governo nella Regione Friuli – Venezia Giulia (Fondo Trieste 2008). 240.000 Euro. Regione Friuli-Venezia Giulia LR 11/2003, bando 2006; progetto SENSTOX, 80.000 Euro.

## ALLEGATO B

### Pubblicazioni e brevetti 2009

1. COZZI F; PELLEGRINI I; ADAMI G.; REISENHOFER E; BOVENZI M; BARBIERI P. (2009). **Sulphur speciation of PM10 samples by XANES spectroscopy**. CENTRAL EUROPEAN JOURNAL OF CHEMISTRY. Vol. 7. pp. 395-401. 10.2478/s11532-009-0052-9. ISSN: 1644-3624.
2. LARESE FILON F.; D'AGOSTIN F; CROSERA M; ADAMI G; BOVENZI M; MAINA G. (2009). **In vitro absorption of metal powders through intact and damaged human skin**. TOXICOLOGY IN VITRO. Vol. 23(4). pp. 574-579. 10.1016/J.TIV.2009.01.015. ISSN: 0887-2333.
3. LARESE FILON F; D'AGOSTIN F; CROSERA M; ADAMI G.; RENZI N; BOVENZI M; MAINA G. (2009). **Human skin penetration of silver nanoparticles through intact and damaged skin**. TOXICOLOGY. Vol. 255. pp. 33-37. 10.1016/j.tox.2008.09.025. ISSN: 0300-483X.
4. MATTEO CROSERA, MASSIMO BOVENZI, GIOVANNI MAINA, GIANPIERO ADAMI, CATERINA ZANETTE, CHIARA FLORIO AND FRANCESCA FILON LARESE, “**Nanoparticle dermal absorption and toxicity: a review of the literature**”, INTERNATIONAL ARCHIVES OF OCCUPATIONAL AND ENVIRONMENTAL HEALTH, 82, 1043-1055 (2009).
5. MARAN E; FERNÁNDEZ M; BARBIERI P.; FONT G; RUIZ M.J. (2009). **Effects of four carbamate compounds on antioxidant parameters**. ECOTOXICOLOGY AND ENVIRONMENTAL SAFETY. Vol. 72 (3). pp. 922-930. 10.1016/j.ecoenv.2008.01.018. ISSN: 0147-6513.
6. L. CAMPANELLA, A. TAPPARO, G. DE GENNARO, P. BARBIERI, F. PASSARINI, A. MAZZONE. (2009) **Innovazione chimica per l'applicazione del REACH**. (pp. 1-64). ROMA: Società Chimica Italiana (ITALY)
7. ALEKSANDER ASTEL, SERGIO COZZUTTO, FEDERICO COZZI, GIANPIERO ADAMI, PIERLUIGI BARBIERI, STEFAN TSAKOVSKI AND VASIL SIMEONOV, “**Source apportionment of PM2.5 in the city of Trieste**”, EURASAP Newsletter (ISSN 2070-2582) 67, 22-32, March 2009.
8. ASARO F.; BENEDETTI A; SAVKO N; PELLIZER G. (2009). **Inverse Nonionic Microemulsion Studied by Means of 1H, 13C, and PGSTE NMR during Silica Nanoparticle Synthesis**. LANGMUIR. Vol. 25. pp. 3224-3231. 10.1021/la803826c. ISSN: 0743-7463.
9. DONATI I; ASARO F; PAOLETTI S.. (2009). **Experimental evidences of counterion affinity in alginates: the case of nongelling ion Mg<sup>2+</sup>**. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. B, CONDENSED MATTER, MATERIALS, SURFACES, INTERFACES & BIOPHYSICAL. Vol. 113. pp. 12877-12886. 10.1021/JP902912M. ISSN: 1520-6106.
10. STEFANO MONARI; ANTONIO RANIERI; GIULIA DI ROCCO; GERT VAN DER ZWAN; SILVIA PERESSINI; TAVAGNACCO C.; DIEGO MILLO; MARCO BORSARI. (2009). **Redox Thermodynamics of Cytochromes C Subjected to Urea Induced Unfolding**. JOURNAL OF APPLIED ELECTROCHEMISTRY. Vol. 39. pp. 2181-2190. ISSN: 0021-891X.
11. BRANCIA F; STENER M.; MAGISTRATO A. (2009). **A Density Functional Theory (DFT) Study on Gas-Phase Proton Transfer Reactions of Derivatized and Underivatized Peptide Ions generated by Matrix-assisted Laser Desorption Ionization**. JOURNAL OF THE AMERICAN SOCIETY FOR MASS SPECTROMETRY. Vol. 20. pp. 1327-1333. 10.1016/j.jasms.2009.03.008. ISSN: 1044-0305.
12. DE FRANCESCO R; STENER M.; FRONZONI G. (2009). **S K-edge NEXAFS Spectra of Model Systems for SO<sub>2</sub> on TiO<sub>2</sub>(110) : a TDDFT Simulation**. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. Vol. 11. pp. 1146-1151. 10.1039/b811925b. ISSN: 1463-9076.
13. NARDELLI A; FRONZONI G; STENER M.. (2009). **Theoretical study on the X-Ray absorption at the sulphur K-edge in gold nanoparticles protected by thiolates**. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. C, NANOMATERIALS AND INTERFACES. Vol. 113. pp. 14844-14851. 10.1021/jp902910y. ISSN: 1932-7447.
14. DECLEVA P.; FRONZONI G; KIVIMÄKI A; ÁLVAREZ RUIZ J; SVENSSON S. (2009). **Shake-up transitions in S 2p, S 2s and F 1s photoionization of the SF<sub>6</sub> molecule**. JOURNAL OF PHYSICS. B, ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS. Vol. 42. pp. 055102. ISSN: 0953-4075.
15. FRONZONI G; STENER M.; DECLEVA P; DE SIMONE M; CORENO M; FRANCESCHI P; FURLANI C; PRINCE K. C. (2009). **X-Ray absorption spectroscopy of VOCl<sub>3</sub>, CrO<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> and**

- MnO<sub>3</sub>Cl: an experimental and theoretical study.** JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A, MOLECULES, SPECTROSCOPY, KINETICS, ENVIRONMENT, & GENERAL THEORY. Vol. 113. pp. 2914-2925. 10.1021/jp808720z. ISSN: 1089-5639.
16. D. M. P. HOLLAND, D. A. SHAW, M. STENER AND P DECLEVA, "A study of the valence shell electronic structure of hexafluorobenzene using photoabsorption and photoelectron spectroscopy, and TDDFT calculations", J. PHYS. B: AT. MOL. OPT. PHYS., 42 245201 (2009).
  17. S. TURCHINI; D. CATONE; G. CONTINI; N. ZEMA; S. IRRERA; STENER M.; D. DI TOMMASO; P. DECLEVA AND T. PROSPERI. (2009). **Conformational effects in photoelectron circular dichroism of alaninol.** CHEMPHYSICHEM. Vol. 10. pp. 1839-1846. 10.1002/cphc.200800862. ISSN: 1439-4235.
  18. STENER M.; FRONZONI G; DECLEVA P. (2009). **Time Dependent Density Functional Theory description of giant resonances in transition metal complexes: the photoionization dynamics of Cr(CO)<sub>6</sub>.** CHEMICAL PHYSICS. Vol. 361. pp. 49-60. 10.1016/j.chemphys.2009.05.006. ISSN: 0301-0104.
  19. YAMAZAKI M; ADACHI J.I; TERAMOTO T; YAGISHITA A; STENER M.; DECLEVA P. (2009). **3-D mapping of photoemission from a single oriented H<sub>2</sub>O molecule.** JOURNAL OF PHYSICS. B, ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS. Vol. 42. pp. 051001 1-5. 10.1088/0953-4075/42/5/051001. ISSN: 0953-4075.
  20. FRIEDRICH J; CORIANI S.; HELGAKER T; DOLG M. (2009). **Implementation of the Incremental Scheme for One-Electron First-Order Properties in Coupled-Cluster Theory.** THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. Vol. 131. pp. 154102-(1-10). ISSN: 0021-9606.
  21. KJÆRGAARD T; JØRGENSEN P; THORVALDSEN A. J; SALEK P; CORIANI S.. (2009). **Gauge-Origin Independent Formulation and Implementation of Magneto-Optical Activity within Atomic-Orbital-Density Based Hartree–Fock and Kohn–Sham Response Theories.** JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION. Vol. 5. pp. 1997-2020. 10.1021/ct9001625. ISSN: 1549-9618.
  22. SHCHERBIN D; THORVALDSEN A. J; RUUD K; CORIANI S.; RIZZO A. (2009). **Analytic calculations of the Buckingham birefringence using London atomic orbitals.** PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. Vol. 11. pp. 816-825. ISSN: 1463-9076.
  23. TEALE A. M; CORIANI S.; HELGAKER T. (2009). **The calculation of adiabatic-connection curves from full configuration-interaction (FCI) densities: two-electron systems.** THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. Vol. 130. pp. 104111-(1-22). 10.1063/1.3082285. ISSN: 0021-9606.
  24. THORVALDSEN A. J; FERRIGHI L; RUUD K; ÅGREN H; CORIANI S.; JØRGENSEN P. (2009). **Analytic ab initio calculations of Coherent anti-Stokes Raman Scattering (CARS).** PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. Vol. 11. pp. 2293-2304. 10.1039/b812045e. ISSN: 1463-9076.
  25. GALASSO V.. (2009). **A DFT investigation of structure and spectroscopic properties of pyrazolo[4,3-e][1,2,4]triazine natural products.** CHEMICAL PHYSICS LETTERS. Vol. 472. pp. 237-242. ISSN: 0009-2614.
  26. GALASSO V.; PICHIERRI F. (2009). **Probing the Molecular and Electronic Structure of Norhipposudoric and Hipposudoric Acids from the Red Sweat of Hippopotams amphibius: A DFT investigation.** JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A, MOLECULES, SPECTROSCOPY, KINETICS, ENVIRONMENT, & GENERAL THEORY. Vol. 113. pp. 2534-2543. ISSN: 1089-5639.
  27. BARRECA D; FORNASIERO P.; GASPAROTTO A; GOMBAC V; MACCATO C; MONTINI T; TONDELLO E. (2009). **The Potential of Supported Cu<sub>2</sub>O and CuO Nanosystems in Photocatalytic H<sub>2</sub> Production.** CHEMSUSCHEM. Vol. 2. pp. 230-233. 10.1002/cssc.200900032. ISSN: 1864-5631.
  28. DE ROGATIS L; FORNASIERO P.. (2009). **Catalysts design for reforming of oxygenates.** In BARBARO P; BIANCHINI C. EDITORS. **Catalysis for Sustainable Energy Production.** pp. 173-233. WEINHEIM. WILEY-VCH. ISBN: 978-3-52732095-0.
  29. DE ROGATIS L; MONTINI T; COGNIGNI A; OLIVI L; FORNASIERO P.. (2009). **Methane Partial Oxidation on NiCu-based catalysts.** CATALYSIS TODAY. Vol. 145. pp. 176-185. 10.1016/j.cattod.2008.04.019. ISSN: 0920-5861.

30. DE ROGATIS L; VESSELLI E; BARALDI A; CASULA M.F; MONTINI T; COMELLI G; GRAZIANI M; FORNASIERO P.. (2009). **Charge Redistribution at the Embedded Rh-Alumina Interface**. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. C, NANOMATERIALS AND INTERFACES. Vol. 113(42). pp. 18069-18074. 10.1021/JP905736Q. ISSN: 1932-7447.
31. GASPAROTTO A; BARRECA D; FORNASIERO P.; GOMBAC V; LEBEDEV O.I; MACCATO C; MONTINI T; TONDELLO E; VAN TENDELOO G; COMINI E; SBERVEGLIERI G. (2009). **Multi-functional copper oxide nanosystems for H<sub>2</sub> sustainable production and sensing**. ECS TRANSACTIONS. Vol. 25. pp. 1169-1176. 10.1149/1.3207721. ISSN: 1938-5862.
32. GOMBAC V; MONTINI T; POLIZZI S; DELGADO- JAÉN J.J; HAMEED A; FORNASIERO P.. (2009). **Photocatalytic Production of Hydrogen over Tailored Cu-Embedded TiO<sub>2</sub>**. NANOSCIENCE AND NANOTECHNOLOGY LETTERS. Vol. 1. pp. 128-133. 10.1166/nnl.2009.1017. ISSN: 1941-4900.
33. HAMEED A; GOMBAC V; MONTINI T; FELISARI L; FORNASIERO P.. (2009). **Photocatalytic activity of zinc modified Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>**. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. Vol. 483. pp. 254-261. 10.1016/j.cplett.2009.10.087. ISSN: 0009-2614.
34. HAMEED A; GOMBAC V; MONTINI T; GRAZIANI M; FORNASIERO P.. (2009). **Synthesis, Characterization and Photocatalytic Activity of NiO-Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Nanocomposites**. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. Vol. 472. pp. 212-216. 10.1016/j.cplett.2009.03.017. ISSN: 0009-2614.
35. HAMEED A; MONTINI T; GOMBAC V; FORNASIERO P.. (2009). **Photocatalytic decolourization of dyes on NiO-ZnO nano-composites**. PHOTOCHEMICAL & PHOTOBIOLOGICAL SCIENCES. Vol. 8. pp. 677-682. 10.1039/b817396f. ISSN: 1474-905X.
36. LEE S; BEVILACQUA M; FORNASIERO P.; VOHS J. M; R.J. GORTE. (2009). **SOFC Cathodes Prepared by Infiltration of LNF and LSNF in Porous YSZ**. JOURNAL OF POWER SOURCES. Vol. 193. pp. 747-753. 10.1016/j.jpowsour.2009.04.046. ISSN: 0378-7753.
37. MONTINI T; BEVILACQUA M; FONDA E; CASULA M.F; LEE S; TAVAGNACCO C; GORTE R.J; FORNASIERO P.. (2009). **Relationship between electrical behavior and structural characteristics in Sr-doped LaNi<sub>0.6</sub>Fe<sub>0.4</sub>O<sub>3-d</sub> mixed oxides**. CHEMISTRY OF MATERIALS. Vol. 21. pp. 1768-1774. 10.1021/cm900467c. ISSN: 0897-4756.
38. MONTINI T; SPEGHINI A; DE ROGATIS L; LORENZUT B; BETTINELLI M; GRAZIANI M; FORNASIERO P.. (2009). **The identification of the structural phases of CexZr1-xO2 by Eu(III) luminescence studies..** JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. Vol. 131. pp. 13155-13160. 10.1021/ja905158p. ISSN: 0002-7863.
39. SIVASAMY A; CHEAH K. Y; FORNASIERO P.; KEMAUSUOR F; ZINOVIEV S; MIERTUS S. (2009). **Catalytic Applications in Biodiesel Production from Vegetable Oils: A Review**. CHEMSUSCHEM. Vol. 2. pp. 278-300. 10.1002/cssc.200800253. ISSN: 1864-5631.
40. B.M. ALZOUBI; F. VIDALI; R. PUCHTA; C. DÜCKER-BENFER; A. FELLUGA; RANDACCIO L.; G. TAUZHER; R. VAN ELDIK. (2009). **Mechanistic behaviour of alkylcobaloximes and imino-oxime complexes related to vitamin B12**. DALTON TRANSACTIONS. pp. 2392-2399. ISSN: 1477-9226.
41. DREOS R.; L. RANDACCIO; P. SIEGA. (2009). **Supramolecules from cobaloximes..** INORGANICA CHIMICA ACTA. Vol. 362. pp. 682-690. ISSN: 0020-1693.
42. R.DREOS; RANDACCIO L.; P.SIEGA; V.VRDOLJAK. (2009). **Intramolecular Cyclization Reactions in Haloalkyl-Cobalt Complexes with Macrocyclic Equatorial Ligands..** CROATICA CHIMICA ACTA. Vol. 82. pp. 455-461. ISSN: 0011-1643.
43. L. MECHI; R. DREOS; S. SIEGA; RANDACCIO L.; E. ZANGRANDO. (2009). **Crystal Structures and Solution Behavior of Paramagnetic Trinuclear Mixed-Valent Cobalt Complexes with Salen-Type Ligands**. EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY. pp. 2629-2638. ISSN: 1434-1948. ]
44. S. J. MOORE; P. SIEGA; R. LACHICOTTE; RANDACCIO L.; L. G. MARZILLI. (2009). **Effects of Equatorial Ligand Bulk on the Orientation of Axial Ligands in Methyl Organocobalt B12 Models Assessed by X-Ray and NMR Methods..** INORGANICA CHIMICA ACTA. Vol. 362. pp. 993-1002. ISSN: 0020-1693.
45. SIEGA P; WUERGES J; ARENA F; GIANOLIO E; FEDOSOV S. N; DREOS R; GEREMIA S.; AIME S; RANDACCIO L. (2009). **Release of toxic Gd<sup>3+</sup> ions to tumour cells by vitamin B12 bioconjugates**. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. Vol. 15. pp. 7980-7989. ISSN: 0947-6539.

46. T.ANDRUNIÓW; M.JAWORSKA; P.LODOWSKI; M.Z.ZGIERSKI; R.DREOS; RANDACCIO L.; P.M.KOZLOWSKI. (2009). **Time-dependent density functional theory study of cobalt corrinoids: Electronically excited states of coenzyme B12.** THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. Vol. 131. pp. 105105. ISSN: 0021-9606.
47. P. KOZLOWSKI; J. KUTA; J. WUERGES; RANDACCIO L.. (2009). **Axial Bonding in Alkylcobalamins: DFT Analysis of the Inverse vs Normal Trans Influence.** JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A, MOLECULES, SPECTROSCOPY, KINETICS, ENVIRONMENT, & GENERAL THEORY. Vol. 113. pp. 11604-11612. ISSN: 1089-5639.
48. R. DE ZORZI; N. GUIDOLIN; L. RANDACCIO; R. PURRELLO; GEREMIA S.. (2009). **Nanoporous Crystals of Calixarene/Porphyry Supramolecular Complex Functionalized by Diffusion and Coordination of Metal Ions.** JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. Vol. 131. pp. 2487-2489. 10.1021/ja808850d. ISSN: 0002-7863.
49. SOOAMBAR C; TROIANI V; BRUNO C; MARCACCIO M; PAOLUCCI F; LISTORTI A; BELBAKRA A; ARMAROLI N; MAGISTRATO A; DE ZORZI R; GEREMIA S.; BONIFAZI D. (2009). **Synthesis, photophysical, electrochemical, and electrochemiluminescent properties of 5,15-bis(9-anthracenyl)porphyrin derivatives.** ORGANIC & BIOMOLECULAR CHEMISTRY. Vol. 7. pp. 2402-2413. ISSN: 1477-0520.
50. ZEITOUNY J; AURISICCHIO C; BONIFAZI D; DE ZORZI R; GEREMIA S.; BONINI M; PALMA C; SAMORI P; LISTORTI A; BELBAKRA A; ARMAROLI N. (2009). **Photoinduced structural modifications in multicomponent architectures containing azobenzene moieties as photoswitchable cores.** JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY. Vol. 19. pp. 4715-4724. ISSN: 0959-9428.
51. V. DE RE, M. P. SIMULA, A. PAVAN, M. GARZIERA, D. MARIN, R. DOLCETTI, S. DE VITA, D. SANSONNO, S. GEREMIA, G. TOFFOLI, "Characterization of antibodies directed against the immunoglobulin light kappa chain variable chain region (VK) of hepatitis C virus-related type-II mixed cryoglobulinemia and B-cell proliferations", ANN N Y ACAD SCI, 1173, 152-160, 2009.
52. A.BANERJEE, S. GANGULY, T. CHATTOPADHYAY, K.S. BANU, A. PATRA, S. BHATTACHARYA, E. ZANGRANDO, D. DAS, **Metal-Assisted Oxazolidine/Oxazine Ring Formation in Dinuclear Zinc(II) Complexes: Synthesis, Structural Aspects, and Bioactivity,** INORG. CHEM., 48, 8695–8702, 2009.
53. K.S. BANU, T. CHATTOPADHYAY, A. BANERJEE, S. BHATTACHARYA, E. ZANGRANDO, D. DAS, **Catechol oxidase activity of dinuclear copper(II) complexes of Robson type macrocyclic ligands: Syntheses, X-ray crystal structure, spectroscopic characterization of the adducts and kinetic studies,** J. MOL. CAT. A, 310, 34–41, 2009.
54. K.S. BANU, T. CHATTOPADHYAY, A. BANERJEE, M. MUKHERJEE, S. BHATTACHARYA, G.K. PATRA, E. ZANGRANDO, D. DAS, **Mono- and dinuclear manganese(III) complexes showing efficient catechol oxidase activity: syntheses, characterization and spectroscopic studies,** DALTON TRANS., 8755-8764, 2009
55. W. BARATTA, M. BALLICO, A. DEL ZOTTO, E. HERDTWECK, S. MAGNOLIA, R. PELOSO, K. SIEGA, M. TONIUTTI, E. ZANGRANDO, P. RIGO, **Pincer CNN Ruthenium(II) Complexes with Oxygen Containing Ligands (O<sub>2</sub>CR, OAr, OR, OSiR<sub>3</sub>, O<sub>3</sub>SCF<sub>3</sub>): Synthesis, Structure and Catalytic Activity in Fast Transfer Hydrogenation,** ORGANOMETALLICS, 28, 4421–4430, 2009.
56. O. DAS, E. ZANGRANDO, T.K. PAINE, **Angular trinuclear copper(II) complexes of N<sub>4</sub>O-donor ligand: Syntheses, crystal structures and magnetic properties,** INORG. CHIM. ACTA, 362 3617–3623, 2009
57. A. DEL ZOTTO; F. IOGNA PRAT; W. BARATTA; E. ZANGRANDO; P. RIGO. (2009). **C-N-palladacyclic-catalyzed Heck reaction in EGME/water: Rate and regioselectivity controlled by the solvents ratio.** INORGANICA CHIMICA ACTA. Vol. 362. pp. 97-104. ISSN: 0020-1693.
58. P. HALDER, B. CHAKRABORTY, P.R. BANERJEE, E. ZANGRANDO, T.K. PAINE, **Role of  $\alpha$ -hydroxycarboxylic acids in the construction of supramolecular assemblies of nickel(II) complexes with nitrogen donor coligands,** CRYST.ENG.COMM, 11, 2650–2659, 2009.
59. P. HALDER, E. ZANGRANDO, T.K. PAINE, **Self-assembly of silver(I) and bis-bidentate N,N-donor ligands: from a tetranuclear complex to coordination polymers,** DALTON TRANS., 5386–5394, 2009.

60. B. LONGATO, D. MONTAGNER, E. ZANGRANDO, **Role of the ancillary ligands on the stabilization of the imino-oxo tautomer of 1-methyl-cytosine in Pt<sup>II</sup> complexes**, DALTON TRANS., 2400–2405, 2009.
61. D. MONTAGNER, E. ZANGRANDO, B. LONGATO, **Stabilization of the iminooxo tautomer of 1-methylcytosine in Pt<sup>II</sup> complexes: Role of the ancillary ligands**, INORG. CHIM. ACTA, 362, 725–732, 2009.
62. E. ZANGRANDO; N. KULISIC; F. RAVALICO; I. BRATSOS; S. JEDNER; M. CASANOVA; ALESSIO E.. (2009). **New ruthenium(II) precursors with the tetradentate sulfur macrocycles tetrathiacyclododecane ([12]aneS4) and tetrathiacyclohexadecane ([16]aneS4) for the construction of metal-mediated supramolecular assemblies.** INORGANICA CHIMICA ACTA. Vol. 362. pp. 820-832. 10.1016/j.ica.2008.02.025. ISSN: 0020-1693.
63. T. GIANFERRARA; I. BRATSOS; ALESSIO E.. (2009). **A Categorization of Metal Anticancer Compounds Based on Their Mode of Action.** DALTON TRANSACTIONS. pp. 7588-7598. ISSN: 1477-9226.
64. T. GIANFERRARA, I. BRATSOS, E. IENGO, B. MILANI, A. OŠTRIĆ, C. SPAGNUL, E. ZANGRANDO, E. ALESSIO (). **Synthetic strategies towards ruthenium-porphyrin conjugates for anticancer activity.** DALTON TRANSACTIONS, 2009, pp.10742- 10756.
65. MILANI B.; AXET M. R; AMOROSO F; BOTTARI G; D'AMORA A; ZANGRANDO E; FARAONE F; DROMMI D; SAPORITA M; CARFAGNA C; NATANTI P; SERAGLIA R. (2009). **Application of Chiral Amine-Imine Ligands in Pd-Catalyzed Polyketone Synthesis: Effect of Ligand Backbone on the Polymer Stereochemistry.** ORGANOMETALLICS. Vol. 28. pp. 4464-4474. 10.1021/om900300w. ISSN: 0276-7333.
66. RIX F. C; RACHITA M. J; WAGNER M. I; MILANI B.; BARBORAK J. C; BROOKHART M. (2009). **Palladium(II)-Catalyzed Copolymerization of Styrenes with Carbon Monoxide: Mechanism of Chain Propagation and Chain Transfer.** DALTON TRANSACTIONS. pp. 8977-8992. 10.1039/B911392D. ISSN: 1477-9226.
67. FARNETTI E; KASPAR J.; CROTTI C. (2009). **A novel glycerol valorization route: chemoselective dehydrogenation catalyzed by iridium derivatives.** GREEN CHEMISTRY. 10.1039/ B819870E. ISSN: 1463-9262.
68. BERTI F.; FORZATO C; FURLAN G; NITTI P; PITACCO G; VALENTIN E; ZANGRANDO E. (2009). **Synthesis of optically active  $\alpha$ -benzyl paraconic acids and their esters and assignment of their absolute configuration.** TETRAHEDRON-ASYMMETRY. Vol. 20 (3). pp. 313-321. 10.1016/j.tetasy.2009.01.027. ISSN: 0957-4166.
69. LASSIANI L; PAVAN M.V; BERTI F.; KOKOTOS G; MARKIDIS T; MENNUNI L; MAKOVEC F; VARNAVAS A. (2009). **Anthranilic acid based CCK1 receptor antagonists: Blocking the receptor with the same 'words' of the endogenous ligand.** BIOORGANIC & MEDICINAL CHEMISTRY. Vol. 17. pp. 2336-2350. 10.1016/j.bmc.2009.02.012. ISSN: 0968-0896.
70. BERTOLI A; FANFONI L; FELLUGA F.; PITACCO G; VALENTIN E. (2009). **Chemoenzymatic synthesis of optically active alpha-methylene-gamma-carboxy-gamma-lactams and gamma-lactones.** TETRAHEDRON-ASYMMETRY. Vol. 20. pp. 2305-2310. ISSN: 0957-4166.
71. CORIANI S.; FORZATO C; FURLAN G; NITTI P; PITACCO G; RINGHOLM M; RUUD K. (2009). **Synthesis, characterization and assignment of the Absolute Configuration of 4,4-dimethyl-5-oxo-tetrahydrofuran-3-carboxylic acid and its esters: a combined experimental and theoretical investigation.** TETRAHEDRON-ASYMMETRY. Vol. 20. pp. 1459-1467. 10.1016/j.tetasy.2009.06.002. ISSN: 0957-4166.
72. F. FELLUGA; W. BARATTA; L. FANFONI; G. PITACCO; P. RIGO; BENEDETTI F.. (2009). **Efficient Chemoenzymatic Synthesis of Chiral Pincer Ligands.** JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY. Vol. 74. pp. 3547-3550. 10.1021/jo900271x. ISSN: 0022-3263.
73. BONORA G.M.; DRIOLI S. (2009). **Reactive PEGs for Protein Conjugation.** In F.VERONESE. **PEGylated Protein Drugs: Basic Science and Clinical Applications.** pp. 33-45. BASEL. Birkhause Verlag AG.
74. BONORA G.M.; VERONESE F. (2009). **Engineering in a PTM: PEGylation.** In G.WALSH. **Biopharmaceuticals: post-translational modifications.** pp. 341-357. WEINHEIM. WILEY-BLACKWELL.
75. ZACCHIGNA M.; CATENI F; VOINOVICH D; GRASSI M; DRIOLI S; BONORA G.M. (2009). **New multidrug (dexamethasone and theophylline) PEG-conjugate: Synthesis, in vitro release**

- studies and intestinal permeability.** JOURNAL OF DRUG DELIVERY SCIENCE AND TECHNOLOGY. Vol. 19 (3). pp. 177-184. ISSN: 1773-2247.
76. C. DE COLA; S. LICEN; D. COMEGNA; E. CAFARO; G. BIFULCO; I. IZZO; TECILLA P.; F. DE RICCARDIS. (2009). **Size-dependent cation transport by cyclic  $\alpha$ -peptoid ion carriers.** ORGANIC & BIOMOLECULAR CHEMISTRY. Vol. 7. pp. 2851-2854. 10.1039/b905665c. ISSN: 1477-0520.
77. F. MANCIN; P. SCRIMIN; TECILLA P.; U. TONELLATO. (2009). **Amphiphilic Metalloaggregates: Catalysis, transport, and sensing.** COORDINATION CHEMISTRY REVIEWS. Vol. 253. pp. 2150-2165. 10.1016/j.ccr.2009.03.015. ISSN: 0010-8545.
78. MANCIN F; TECILLA P.. (2009). **Artificial Restriction Agents: Hydrolytic Agents for DNA Cleavage.** In N. HADJILIADIS; E. SLETTEN. **Metal Complex-DNA Interactions.** pp. 369-394. CHICHESTER. John Wiley and Sons. ISBN: 978-1-4051-7629-3.
79. S. LICEN; C. COPPOLA; J. D'ONOFRIO; D. MONTESARCHIO; TECILLA P.. (2009). **CyPLOS: a new family of synthetic ionophores.** ORGANIC & BIOMOLECULAR CHEMISTRY. Vol. 7. pp. 1060-1063. 10.1039/b820906e. ISSN: 1477-0520.
80. C. GENTILINI; P. FRANCHI; E. MILEO; S. POLIZZI; M. LUCARINI; PASQUATO L.. (2009). **Formation of patches in 3D monolayers driven by thiols with immiscible chains revealed by ESR spectroscopy.** ANGEWANDTE CHEMIE. INTERNATIONAL EDITION. Vol. 47. pp. 3060-3064. 10.1002/anie.200805321. ISSN: 1433-7851.
81. GENTILINI C; PASQUATO L.. (2009). **Morphology of Mixed-Monolayers Protecting Metal Nanoparticles.** JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY. Vol. 19. 10.1039/b912759c. ISSN: 0959-9428.

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

1. GIANPIERO ADAMI "**Composizione sverniciante e dispositivo di applicazione della stessa per sverniciatura a strappo**", brevetto depositato in Italia n.º: PD2009A000104 (23 aprile 2009).
2. P. FORNASIERO, M. GRAZIANI, T. MONTINI, B. LORENZUT, "**Catalysts supported on ZnO for syn-gas production by alcohols reforming and their use.**", WO/2009/016177

## ALLEGATO C

### Partecipazioni a Congressi e seminari per invito.

1. C. Zanette, C. Florio, M. Crosera, G. Adami, M. Bovenzi, F. Filon Larese, "Effetto citotossico di nanoparticelle d'argento su cheratinociti umani HaCaT in cultura", XV Congresso Nazionale della Società Italiana di Tossicologia, Verona, 19-22 gennaio 2009, poster
2. C. Zanette, C. Florio, M. Crosera, G. Adami, M. Bovenzi, F. Filon Larese, "Cytotoxicity of silver nanoparticles on human HaCaT keratinocytes", OEESC2009, Occupational and Environmental Exposure of the Skin to Chemicals, Edimburgo, 14-17 giugno 2009, poster
3. F. Larese Filon, M. Crosera, G. Adami, F. D'Agostin, M. Bovenzi, G. Maina, "Human skin penetration of gold nanoparticles: an in-vitro assessment", OEESC2009, Occupational and Environmental Exposure of the Skin to Chemicals, Edimburgo, 14-17 giugno 2009, presentazione orale
4. M. Crosera, F. Larese Filon, M. Bovenzi, G. Maina, E. Reisenhofer, G. Adami, "Human skin penetration of gold nanoparticles through intact and damaged skin", XXIII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Sorrento, 5-10 Luglio 2009, poster
5. F. Cozzi, G. Gržinić, S. Cozzutto, P. Barbieri, G. Adami, "Dimensional characterization of low-Z elements in airborne PM10 samples using  $\mu$ -SRXRF", EUROANALYSIS- 2009, Innsbruck (Austria), 6-10 settembre 2009 P054-B2, poster
6. NMR and rheology of cationic micelles containing sodium taurodeoxycholate. F. Asaro, L. Coppola and L. Gentile XXIII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, 5-10 luglio 2009, Sorrento (Napoli), poster.
7. Study of the evolution of tetraethylorthosilicate (TEOS) in acid inverse microemulsion systems. F. Asaro, A. Benedetti, I. Freris, P. Riello and N. Savko XIV International Conference on Small Angle Scattering 13<sup>th</sup>-18<sup>th</sup> September 2009, Oxford (UK), poster.
8. M. Stener, G. Fronzoni, A. Nardelli and R. De Francesco, "Photoabsorption of gold nanoparticles: a TDDFT analysis by cluster model", Theoretical Tools for In-silico Spectroscopy (TheTIS), Pisa, 18-20 February 2009, Oral contribution
9. P. Decleva, "A DFT SAE model for molecular strong field ionization", Workshop "Nanoscale Modelling of new molecular experiments:, Theoretical and Computational Simulations", Roma, March 6th 2009, Oral contribution
10. S. Coriani, "In silico determination of magnetic circular dichroism parameters and spectra", Workshop "Nanoscale Modelling of new molecular experiments:, Theoretical and Computational Simulations", Roma, March 6th 2009, Oral contribution
11. S. Coriani, T. Kjærgaard, P. Jørgensen, A. Thorvaldsen, K. Ruud, R. Berger, "In silico determination of optical and spectroscopic properties: a few recent methodological and applicative results" (poster), Molecular Properties '09- Bridging the gap between theory and experiment, An ICQC 2009 satellite symposium. June 18-21, Oslo, Norway
12. M. Stener, P. Decleva, M. Yamazaki, J. Adachi, T. Teramoto and A. Yagishita, "Photoelectron angular distribution from core ionization of a single oriented NO<sub>2</sub> molecule", COST action CM0702, International Workshop on ATOMIC PHYSICS: "Ultra-fast dynamics in finite atomic and molecular systems probed with novel light sources", Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems (MPIPKS), Dresden, 23 - 25 november 2009, poster.

13. P. Fornasiero, Embedded metal particles: a way to active and stable catalysts”, 1<sup>st</sup> International Conference on Nanostructured Materials and Nanocomposites, Kottayam, India, Maggio 2009 (invited lecture, P. Fornasiero)
14. B. Lorenzut, T. Montini, M. Bevilacqua, P. Fornasiero, M. Graziani, "Ruthenium nanoparticles embedded catalysts for H<sub>2</sub> production from ammonia decomposition.", Summer School in Catalysis 2009, Porto Carras, Grecia, Maggio 2009 (poster)
15. V Gombac, T. Montini, L. Sordelli, M.Cargnello, M. Graziani, P. Fornasiero, "Photocatalytic H<sub>2</sub> over optimized Cu<sub>x</sub>O-TiO<sub>2</sub> nanocomposites" Summer School in catalysis 2009, Porto Carras, Grecia, Maggio 2009 (poster)
16. T. Montini, M. Cargnello, C. Gentilini, L. Pasquato, P. Fornasiero, S. Mehraeen, N. D. Browning, E. Fonda, "Design of active and stable catalysts for H<sub>2</sub> purification.", E-MRS 2009 Spring Meeting, Strasbourg, Giugno 2009. (comunicazione orale, T. Montini)
17. Davide Barreca, Paolo Fornasiero, Alberto Gasparotto, Valentina Gombac, Oleg I. Lebedev, Chiara Maccato, Tiziano Montini, Eugenio Tondello, and Gustaaf Van Tendeloo, "Tailored copper oxide nanosystems for photocatalytic H<sub>2</sub> production", E-MRS 2009 Spring Meeting, Strasbourg, Giugno 2009. (comunicazione orale, D. Barreca)
18. P. Fornasiero, V. Gombac, T. Montini, L. Sordelli, M.Cargnello, M. Graziani, "Photocatalytic H<sub>2</sub> production over optimized CuO<sub>x</sub>-TiO<sub>2</sub> nanocomposites ", VII Convegno Nazionale Consorzio Scienza e Tecnologia dei Materiali, Tirrenia, Italia, giugno 2009 (comunicazione orale, P. Fornasiero)
19. V. Gombac, T. Montini, M. Cargnello, M. Graziani and P. Fornasiero, "Metal doped TiO<sub>2</sub> for hydrogen production", *Slovenian Conference on Materials and Technologies for Sustainable Growth*, Ajdovscina, Slovenia, Maggio 2009 (orale M. Cargnello)
20. T. Montini, M. Cargnello, C. Gentilini, L. Pasquato, P. Fornasiero, S. Mehraeen, N. D. Browning, E. Fonda, "Design of active and stable Au catalysts for H<sub>2</sub> purification", International Conference "Gold 2009", Heidelberg (Germany) Luglio 2009, (poster)
21. A. Gasparotto, D. Barreca, P. Fornasiero, V. Gombac, O.I. Lebedev, C. Maccato, T. Montini, E. Tondello, G. Van Tendeloo, E. Comini, G. Sberveglieri, "Aqueous multi-functional copper oxide nanosystems for H<sub>2</sub> sustainable production and sensing", 216th ECS Meeting, Vienna, Austria, Ottobre 2009 (comunicazione orale, A. Gasparotto)
22. L. D. Vella, S. Specchia, V. Specchia, B. Lorenzut, T. Montini, P.Fornasiero, "Fixed beds of Rh/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-based catalysts for syngas production in methane SCT-CPO reactors", HYSYDAYS 2009, Torino, Italia, Ottobre 2009 (comunicazione orale, L. D.Vella)
23. N.Hickey, I.Boscarato and J.Kašpar, "Advanced solutions for the pollution abatement from ships cruising the motorways of the sea", EUROPACAT 9, Salamanca, Spain, 30 agosto – 4 settembre 2009 (orale).
24. E. Alessio, I. Bratsos, T. Gianferrara "A categorization of metal anticancer compounds based on their mode of action." COST D39 Action Meeting, Debrecen (Hungary), September 24-25, 2009. Keynote lecture
25. I. Bratsos, T. Gianferrara, E. Iengo, B. Milani, A. Ostric, C. Spagnul, E. Zangrando, E. Alessio "Synthetic strategies towards ruthenium-porphyrin conjugates for anticancer activity." COST D39 Action Meeting, Debrecen (Hungary), September 24-25, 2009. Presentazione orale (I. Bratsos).

26. I. Bratsos, E. Alessio, T. Gianferrara "A categorization of metal anticancer compounds based on their mode of action." 10th International Symposium on Applied Bioinorganic Chemistry, Debrecen (Hungary), September 25-28, 2009. Poster
27. C. Spagnul, T. Gianferrara, I. Bratsos, E. Alessio "Synthesis and structural characterization of meso-tetra(bpy)-porphyrins peripherally conjugated to water-soluble ruthenium fragments for bio-medical applications." 10th International Symposium on Applied Bioinorganic Chemistry, Debrecen (Hungary), September 25-28, 2009. Poster.
28. E. Alessio "Metal-mediated nanoscopic assemblies of chromophores for molecular electronics, light energy conversion, and molecular recognition." COST D31 Final Action Meeting, Warsaw (Poland), May 28-29, 2009. Presentazione orale
29. M. Boccalon, E. Iengo, E. Alessio, P. Tecilla "metal-organic nanotubes for trans membrane transport." IX Congresso Nazionale di Chimica Supramolecolare, Parma, 6-9 settembre 2009. Poster.
30. T. Gatti, E. Iengo, E. Alessio, M. T. Indelli, F. Scandola, M. Orlandi "Easy to make porphyrin-Re(I) dyads for photophysical applications." IX Congresso Nazionale di Chimica Supramolecolare, Parma, 6-9 settembre 2009. Poster.
31. A. D'Amora, L. Fanfoni, F. Felluga, E. Zangrando, D. Cozzula, S. Gladioli, F. Benedetti, B. Milani "Effect of 6-alkyl substituted 2,2'-bipyridines in the Pd-catalyzed styrene carbonylation: shifting the selectivity from polyketones to oligoketones" X Netherlands' Catalysis and Chemistry Conference, Noordwijkerhout (Olanda), 2 - 4 Marzo 2009; Comunicazione orale.
32. A. Campos-Carrasco, C. Tortosa-Estorach, A. D'Amora, B. Milani, W. Leitner, A. M. Masdeu-Bultò "New perfluorinated 2,2'-bipyridine ligands applied to the Pd-catalyzed CO/styrene copolymerization in green and conventional media" International symposium on Organometallic Chemistry and Catalysis: Renacom 2009, Tetouan (Morocco), 29 - 30 Aprile 2009, Poster.
33. S.Drioli, G.M.Bonora, V.Rapozzi, L.Xodo, Synthesis and activity in photodynamic therapy of poly(ethylene glycol) conjugated pheophorbide, BIOTECH.ORG- Organic Chemistry and Biotechnology: Challenges and Opportunities, Forte dei Marmi, 20-23 maggio 2009, Poster P9
34. M.Zacchigna, F.Cateni, G.M.Bonora, S.Drioli, Synthesis and pharmacological properties of amixed drug system conjugated to a single high-molecular weight multiPEG-derivative, BIOTECH.ORG- Organic Chemistry and Biotechnology: Challenges and Opportunities, Forte dei Marmi, 20-23 maggio 2009, Poster P10
35. F.Benedetti, F.Berti, P.Campaner, G.-M.Bonora, S.Drioli, Synthesis and activity of a double HIV-PR inhibitor conjugated on a bifunctional high-molecular weight poly(ethylen glicol) unit, BIOTECH.ORG- Organic Chemistry and Biotechnology: Challenges and Opportunities, Forte dei Marmi, 20-23 maggio 2009, Poster P11
36. F.Cateni. M. Zacchigna, P.Martinuzzi, S. Drioli, G.M.Bonora, Synthesis and pharmacological properties of amixed drug system conjugate to a single high-molecular weight MutliPEG-derivative, XXIII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Sorrento, 5-10 luglio 2009, Poster FAR-PO-18.
37. M.Zacchigna, F.Cateni, S.Drioli, G.M.Bonora, PEG and MultiPEG-THEO: PK analysis, XXIII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Sorrento, 5-10 luglio 2009, Poster FAR-PO-110

38. C. Gentilini, P. Franchi, E. Mileo, M. Lucarini, V. Lapointe, M. M. Stevens, and L. Pasquato, "Self-Assembled 3D Mixed Monolayers for Biomedical Applications". Gordon Research Conference – Macromolecular Materials; Ventura, CA (US), 11-16 January 2009.
39. A. Pace, L. Pasquato, "Sintesi e funzionalizzazione di nanoparticelle di oro solubili in mezzi acquosi". XXXIV Scuola "A. Corbella" di Chimica Organica, Gargnano 21-26 giugno 2009 Gargnano (Bs). Poster
40. P. Franchi, C. Gentilini, L. Pasquato, M. Lucarini. "Formation of patches on 3D self-assembled monolayers driven by thiols with immiscible chains observed by ESR spectroscopy." XXIII Congresso SCI, 5-10 luglio 2009, Sorrento. Oral presentation by Lucarini.
41. A. Pace, C. Lunghi, B. Richichi, C. Nativi, L. Pasquato, "Synthesis and functionalization of water-soluble gold nanoparticles" IX Congresso Nazionale di Chimica Supramolecolare, Parma 6-9 Settembre 2009. Poster
42. C. Forzato, P. Nitti, G. Pitacco, E. Valentin, The first kinetic enzymatic resolution of alkyl esters of C75. BIOTECH.ORG, Forte dei Marmi (LU), 20-23 maggio 2009, poster.
43. F. Felluga, G. Pitacco, E. Valentin, C.D. Venneri, A facile chemo-enzymatic asymmetric synthesis of  $\beta,\beta'$ -dialkylated  $\gamma$ -aminobutyric acids, XXIII Congresso Nazionale della SCI Sorrento 5-10 luglio 2009, Libro degli abstract, ORG-PO-20, poster.
44. A. Bertoli, F. Felluga, G. Pitacco, E. Valentin "Chemoenzymatic synthesis of optically active  $\alpha$  methylene- $\gamma$ -lactones and  $\gamma$ -lactams XXIII Congresso Nazionale della SCI Sorrento 5-10 luglio 2009, Libro degli abstract, ORG-PO-21.
45. U. Cersosimo, F. Benedetti, S. Drioli, C. Brancolini, Synthesis and pro-apoptotic activity of cytotoxic analogues of 3,5- bis(4-nitro-benzylidene)-tetrahydrotiopyran-4-one-1,1-dioxide (G5). XXIII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, Sorrento 5-10 luglio 2009, poster ORG-PO-20.
46. U. Cersosimo, F. Benedetti, F. Berti, S. Drioli, C. Brancolini. Sintesi ed attività pro-apoptotica di ariliden-cicloalcanoni. I Giovani e la Chimica in Friuli – Venezia Giulia, Trieste 24 settembre 2009, comunicazione orale.
47. P. Plossi, P. Barbieri, R. Braut, A. Altobelli Terrestrial and marine ecosystems playing a key role in CO<sub>2</sub> balance in Province of Trieste ABC-OR-1 XXIII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana Sorrento, 5-10 Luglio 2009 (Orale)
48. J. Falomo, L. Giorgini, L. Capriglia, P. Barbieri Development and optimization of fast and reliable methods for the determination of organotin compounds in the marine environment using SPME ABC-OR-13 XXIII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana Sorrento, 5-10 Luglio 2009 (Orale)
49. J. Falomo, L. Giorgini, N. Skert, N. Miani, R. Grahonja, P. Barbieri An innovative passive sampling system for assessing the distribution of particulate PAHs in the city of Trieste ABC-OR-17 XXIII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana Sorrento, 5-10 Luglio 2009 (Orale)
50. P. Plossi, P. Barbieri Airborne micropollutants in Province of Trieste ABC-OR-26 XXIII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana Sorrento, 5-10 Luglio 2009 (Orale)
51. M. Sesso, C. della Torre, L. Di Monte, P. Barbieri PAH's degradation in the rhizosphere of *Festuca arundinacea* and *Medicago sativa* ABC-PO-16 XXIII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana Sorrento, 5-10 Luglio 2009 (Poster)

52. P. Barbieri, F. Cozzi, A. Mazzatenta, L. Di Monte, G. Pignolo Terrestrial gastropods as sentinel species as biomonitor system ABC-PO-31 XXIII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana Sorrento, 5-10 Luglio 2009 (Poster)
53. Urbani R. , Barbieri P. Pressioni antropiche sull'ecosistema marino costiero II Convegno Regionale International Society Doctors for the Environment – FVG Udine, 28 novembre 2009 (Orale)
54. B. Milani, F. Ragaini, C.J. Elsevier, E. Zangrando, Systematic study of Pd complexes with aryl-BIAN ligands, XXIII Congresso SCI, Sorrento, 5-10 luglio 2009, Comunicazione orale
55. N. Demitri, VIII EUROPEAN SYMPOSIUM OF THE PROTEIN SOCIETY, Zurigo, Svizzera, 14.6.2009 - 18.6.2009, Poster

#### SEMINARI SU INVITO:

1. B. Milani “Pd-catalyzed carbonylation reactions: how subtle changes in the ligand electronic properties can induce large effects” Università di Fribourg (Svizzera), Giugno 2009.
2. B. Milani “Pd-catalyzed carbonylation reactions: how subtle changes in the ligand electronic properties can induce large effects” ETH di Zurigo (Svizzera), Giugno 2009.
3. B. Milani “Effect of 6-alkyl-substituted 2,2'-bipyridines in Pd-catalyzed styrene carbonylation: shifting the selectivity from polyketones to oligoketones” COST-Action D40 3<sup>rd</sup> meeting; Turku (Finland), 25 – 28 Maggio 2009; Keynote Lecture.
4. P. Fornasiero, “Photocatalytic production of hydrogen over tailored CuO<sub>x</sub>-embedded TiO<sub>2</sub>, COST D41 Working Group 2 “Oxides Surface Chemistry, Cracovia, Polonia, Maggio 2009. (invited lecture, P. Fornasiero)
5. P. Fornasiero, “Aqueous-phase reforming process and catalytic hydrogen production from biomass.”, P. Fornasiero, Training Course and Summer School on Next Generation Biofuels: Development and Integration of sustainable chemical processes for production of biofuels and bio-based chemicals, Bologna, Italia, Settembre 2009
6. P. Fornasiero, “Embedded metal particles: a way to active and stable catalysts”, 10<sup>th</sup> International FIGIPAS Meeting, Palermo, Italia, Luglio 2009
7. P. Fornasiero, “Embedded metal particles: a way to active and stable catalysts ”, Meeting Italo-Coreano di Chimica Inorganica, Pohang, Corea del Sud, Settembre 2009
8. E. Alessio “A categorization of metal anticancer compounds based on their mode of action.” Università di Firenze, Dipartimento di Chimica, 12 Giugno 2009.
9. L. Pasquato, “L'evoluzione dei sistemi solforati: dalle piccole molecole alle nanostrutture”, C@pday, Firenze, 23 gennaio 2009.
10. E. Iengo “Discrete metal-mediated multi-chromophore assemblies.” IX Congresso Nazionale di Chimica Supramolecolare, Parma, 6-9 settembre 2009.
11. F. Benedetti, Synthesis and Properties of three- and four- membered carbocycles. XXXIV “A. Corbella” Summer School, Gargnano, atti 97-115.
12. E. Azzoni, F. Benedetti, F. Berti, M. De March, G. Fontanive, S. Geremia, R. Marzari, A. Savoini, D. Sblattero. Peptides as biosensor transducers: design, library selection, xanthine

recognition and trimeric coiled-coil structure of KE1, a 35 aminoacid peptide. Biotech.org, Chimica Organica e Biotecnologie, Sfide e Opportunità, Forte dei Marmi, 20-23 maggio 2009, comunicazione orale.

13. P. Barbieri Wood Biomass burning and atmospheric particulate matter: complementary approaches for impact assessment and emission reduction School of Environmental Sciences University of Nova Gorica (SLOVENIA) March 19th, 2009
14. P. Barbieri Emerging pollutants and efficiency of environmental monitoring and toxicity testing Euro-Mediterranean University (EMUNI University) Portorož (SLOVENIA), 12/05/2009

## ALLEGATO D

### Collaborazioni Nazionali

- Università di Trieste, Dipartimento di Scienze di Medicina Pubblica, Prof. Massimo Bovenzi, Dr.ssa F. Larese
- Università di Trieste, Dipartimento di Scienze della Vita, Dott.ssa Chiara Florio, Prof. G. Sava, Prof. A. Tossi, prof. R. Marzari
- Università di Trieste, Dipartimento di Scienze Farmaceutiche; Prof. M. Prato, Dr. T. Gianferrara, Dr. M. Zacchigna
- Università di Trieste, Dipartimento dei Materiali e delle Risorse Naturali (prof. A. Tubaro)
- ARPA FVG (dott. Italo Pellegrini, Luigi Giorgini)
- ICGEB Trieste, Gruppo di virologia (dott. A. Marcello)
- CNR-ISM (Dr. C. Crotti)
- Elettra-Sincrotrone (Trieste) - SYRMEP beamline (micro-CT), Dr.ssa Giuliana Tromba
- ICS-UNIDO Trieste (prof. S. Miertus).
- SISSA Trieste, Gruppo di Fisica Statistica (dott. A. Laio)
- Provincia di Trieste (dott. Paolo Plossi),
- Regione Autonoma Friuli Venezia Giulia – Centro Regionale di Catalogazione e Restauro dei Beni Culturali, Dr. A. Giacomello
- Università di Udine, Dipartimento di Storia e Tutela Beni Culturali, Prof. A. Gorassini
- Università di Udine, Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche; Prof. A. Trovarelli, Prof. P. Rigo
- Università di Udine, Dip. Scienze e Tecnologie Biomediche; prof. A. Brancolini, Prof. L. Xodo
  
- CNR, Istituto di Fisica Applicata, Sesto Fiorentino (FI), Prof. Roberto Pini
- CNR Firenze, Dr. C. Bianchini
- CNR-ISTM (Dr. N. Ravasio)
- CNR Milano, Dr. R. Psaro
- CNR di Padova, Dott.ssa Roberta Seraglia
- Politecnico di Torino, Prof. S. Specchia
- Università di Bari, Prof. M. Coluccia
- Università di Bari, Dipartimento di Chimica (dr. Gianluigi de Gennaro),
- Università della Basilicata, Dip. Scienze Chimiche (prof. M. Funicello)
- Università di Bologna, Dott. C. Boga
- Università di Bologna, Dipartimento di Chimica Organica A. Mangini, Prof. Marco Lucarini
- Università di Bologna, Dipartimento di Chimica Industriale (dr. Fabrizio Passarini)
- Università di Catania, Prof. R. Purrello
- Università della Calabria, Prof. L. Coppola
- Università di Ferrara, Prof. Franco Scandola
- Università di Ferrara, Dipartimento di Morfologia ed Embriologia
- Università di Firenze, Prof. L. Messori
- Università di Firenze, Dipartimento di Chimica, Dr. Maurizio Muniz-Miranda
- Università di Firenze, Dipartimento di Chimica Organica; Prof. A. Brandi, Prof. Cristina Nativi
- Università di Messina; Prof. Felice Faraone, Prof. S. Perathoner
- Università di Milano, Prof. Fabio Ragaini
- Università di Milano-Bicocca, Dipartimento di Scienza dei Materiali
- Università di Milano-Bicocca, Dipartimento di Scienze Ambientali (dr. Andrea Piazzalunga, dr. Grazia Perrone),
- Università di Modena e Reggio Emilia, Prof. Prati.
- Università “Federico II” di Napoli, Dipartimento di Chimica Organica e Biochimica, Prof. D. Montesarchio
- Università di Napoli “Parthenope”, Dipartimento di Scienze Applicate (dr. Angelo Riccio)

- Università di Padova, Dipartimento di Scienze Chimiche; Prof. E. Tondello, Dott. F. Mancin, Prof. P. Scrimin, Prof. B. Longato
- Università di Padova, Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, Prof. M. Palumbo
- Università di Parma, Dipartimento di Chimica Organica e Industriale, Prof. A. Casnati
- Università di Salerno, Dipartimento di Chimica, Prof. F. De Riccardis
- Università di Sassari, Prof. Serafino Gladiali
- Università di Torino, Laboratorio di Igiene Industriale, Prof. G. Maina
- Università di Urbino, Dott.ssa Carla Carfagna, Prof. O.A. Attanasi
- Università di Venezia Ca' Foscari, Dipartimento di Chimica Fisica; Prof. A. Benedetti, Prof. Stefano Polizzi
- Università di Verona, Prof. M. Bettinelli

### **Collaborazioni Internazionali**

- Università di Sofia “St. Kliment Ohridski” (Bulgaria) (Prof. Vasil Simeonov, Stefan Tsakovski)
- National Center of Infectious Diseases. Sofia. (Bulgaria) Prof. R. Argirova.
- Università di Strasburgo (Francia), Prof. J.-P. Sauvage
- University of Wuzburg (Germania), Prof. F. Wurthner
- Università di Dublino (Irlanda), Prof. Martin Albrecht
- National Cancer Institute, Amsterdam (Olanda).
- Università di Eindhoven (Olanda), Prof. Dieter Vogt
- University of Groningen, Materials Science Centre, The Netherlands, Prof. Petra Rudolf
- University of Ljubljana, SLO, Chair of Physical Chemistry, (prof. Ksenija Kogej)
- ICIQ Tarragona (Spagna) Prof. Pablo Ballester, Prof.ssa Anna Masdeu Bultò
- University of Cadice, Spagna, Prof. S Bernal
- Imperial College London, Department of Materials, UK, Prof. Molly M. Stevens
- Queen Mary, University of London, Dept. of Chemistry and Biochemistry, UK (dott. M. Resmini)
- University of Cambridge (UK). Dr. Dan Pantos, Prof. J. K. Sanders
- Centro Atomico Bariloche, Argentina, Prof. F. Lovey
- Tohoku University, Department of Applied Chemistry, Aoba-yama 6-6-07, Sendai 980-8579, Japan. Prof. F. Pichierri
- Accademia delle Scienze di Pomerania (Polonia) (Dr. Aleksander Astel)
- Novartis Institute for Tropical Diseases, Singapore
- University of Pennsylvania, Philadelphia, USA, Prof. R.J. Gorte
- Università di Louisville, KE (USA), Prof. P.M. Kozlowski
- University of Calcutta, India, Dr. D. Das
- Indian Association for the Cultivation of Science, Calcutta, India, Dr. T. Paine

## **ALLEGATO E**

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

08-giu-09.

Dr. G.Dan Pantos, Università di Cambridge (UK)  
Spectacular chemistry of naphthalenediimides

30-giu-09.

Prof. F. Ragaini, Università di Milano  
Complessi di Palladio Pentacoordinati ed Effetti Bifunzionali in Chimica Organometallica

17-set-09.

Prof. A. Maccioni, Università di Perugia  
NMR techniques for investigating the supramolecular structure in solution

24-set-09.

Prof. A. Albini, Università di Pavia  
Ciamician e la presa di coscienza della chimica

24-set-09.

Dr. A. Carli  
Sistemi dispersi liquidi sub-micron: opportunità nel campo farmaceutico

18-nov-09.

Prof. E. Rizzarelli, Università di Catania  
Metallostat e proteostasi nella patologia di Alzheimer

20-nov-09.

Prof. N. Cherepkov, Università di San Pietroburgo (RU)  
A new method to study molecular Auger decay

## **Allegato F**

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

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

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

Presso il Dipartimento di Scienze Chimiche:

5.3.2009: 60 studenti dell'Istituto Tecnico Torricelli di Maniago, e 30 studenti dell'ITG Pacassi Gorizia

Presso gli Istituti:

6.5.2009: Liceo Einstein Cervignano, 30 studenti;

3.12.2009: Liceo Oberdan Trieste, 60 studenti

##### **Le nanotecnologie.** (Prof. Mauro Stener)

presso gli Istituti:

7.4.2009: Liceo Grigoletti di Pordenone, 70 studenti

8.5.2009: Liceo per gli Sport invernali I. Bahmann, Tarvisio (UD), 50 studenti

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

Presso il Dipartimento di Scienze Chimiche

5.3.2009: Istituto Tecnico Torricelli di Maniago, 60 studenti.

Presso gli Istituti:

4.4.2009: ITAS di Gorizia, 60 studenti.

22.4.2009 Liceo Grigoletti di Pordenone, 60 studenti.

18.05.09 Liceo Scientifico Einstein di Cervignano, 50 studenti.

##### **Le marmitte catalitiche** (Prof. Paolo Fornasiero)

Presso gli Istituti

2.4.2009: ITAS D'Annunzio di Gorizia, 30 studenti

##### **L'idrogeno quale vettore energetico: problemi e prospettive.** (Prof. Paolo Fornasiero)

Presso gli Istituti:

8.5.2009: ITG Pacassi di Gorizia, 30 studenti

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

Presso gli Istituti:

6.4.2009: Lic. Classico Dante di Trieste, 75 studenti

20.5.2009. Lic. Sc. Galilei di Trieste, 20 studenti

Presso il Dipartimento di Scienze Chimiche:

22.5.2009, 16 studenti del Lic. Sc. Galilei di Trieste,

##### **L'acqua, molecola psicotica bene dell'umanità** (Prof. Attilio Cesaro)

Presso gli Istituti:

29.1.2009, ITAS D'ANNUNZIO di Gorizia, 20 studenti

##### **La valutazione del rischio chimico nell'ambiente** (Dr. Pierluigi Barbieri)

Presso gli Istituti:

23.2.2009: I.T.I.S. "J.F.Kennedy" (chimici) Pordenone, 60 studenti

##### **La Forma delle Molecole** (Prof. F. Benedetti)

Presso gli Istituti:

febbraio 2009: Liceo Scientifico Magrini, Gemona del Friuli, 50 studenti

marzo 2009: Liceo Scientifico Grigoletti, Pordenone, 60 studenti

## 2. Stage:

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

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

26.3.2009: 2 studenti del Liceo Bachmann di Tarvisio.

**Biotrasformazioni in chimica organica: il caso del lievito da panettiere** (Prof. Patrizia Nitti)

2.2.2009:

2 studenti dell'istituto Liceo Scientifico "M. Buonarroti" di Monfalcone

4 studenti dell'istituto Liceo Scientifico "G. Marinelli" di Udine

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

14.3.2009:

12 studenti del Liceo Scientifico Galilei di Trieste,

15 studenti del Liceo Scientifico Oberdan di Trieste

## 3. Esperienze di Laboratorio Permanente

### REATTIVITÀ CHIMICA: UN CICLO DI REAZIONI DEL RAME

Docenti: Prof. Enzo Alessio e Dr. Barbara Milani

19.03.09: 18 studenti di una classe IV del Liceo Scientifico Oberdan di Trieste

06.04.09: 17 studenti di una classe IV del Liceo Scientifico Oberdan di Trieste

05.05.09: 15 studenti di una classe IV del Liceo Scientifico Galilei di Trieste

13.05.09: 8 studenti di una classe IV del Liceo Scientifico Galilei di Trieste

### DETERMINAZIONE DI UN CALORE DI COMBUSTIONE

Docenti: Prof. Renata Dreos e Dr. Patrizia Siega

29.01.2009: 20 studenti di classe IV dell' ITAS D'ANNUNZIO (Gorizia)

05.03.2009: 20 studenti di classe IV dell' ITAS D'ANNUNZIO (Gorizia)

### DETERMINAZIONE DELLA CONCENTRAZIONE DI SPECIE IN SOLUZIONE PER VIA SPETTROFOTOMETRICA

Docente: Dr. Gabriele Balducci

18.03.2009: 16 studenti di classe IV del Liceo Scientifico "Galilei" di Trieste

05.05.2009: 12 studenti di classe IV del Liceo Scientifico "Galilei" di Trieste

### ESTRAZIONE DEL (+)-CARVONE DA SEMI DI KÜMMEL

Docente: Dr. Sabina Licen

29.10.2009: 7 studenti di classe IV del Liceo Scientifico "Galilei" di Trieste

### DETERMINAZIONE DEL GRADO ALCOLICO DEL VINO

Docente: Dr. Sabina Licen

04.07.2009: 14 studenti di classe IV 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. CHEMSHOW: le meraviglie della chimica

Curato dal Dr. Claudio Tavagnacco. L' iniziativa "ChemShow" ha 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, oppure in occasione di manifestazioni pubbliche. Sono effettuate le seguenti dimostrazioni:

11 febbraio: European School of Trieste: classe III media, 12 studenti

25 maggio: Presso il Dip. Sc. Chimiche: 4 allievi scuola elementare

25 settembre: Piazza Unità d'Italia: Notte dei ricercatori: oltre 2000 persone

29 settembre: Muggia: "Giochi di Scienze": 100 allievi scuole elementari

23 ottobre: Scuola media Italo Svevo TS: 60 studenti

12 novembre: European School of Trieste: classe II media, 12 studenti