

Atti e Convegni



Società Chimica Italiana Congresso Congiunto delle Sezioni Sicilia e Calabria 2019

Palermo • 1 - 2 marzo 2019

ATTI DEL CONGRESSO

Dipartimenti
STEBICEF • DIFC

Viale delle Scienze • Edificio 17
Università degli Studi di Palermo



PALERMO
UNIVERSITY
PRESS

*Società Chimica Italiana
Congresso Congiunto delle Sezioni Sicilia e Calabria 2019
Palermo, 1-2 marzo 2019*

Comitato Scientifico

Pietro Argurio, Anna Barattucci, Paola Cardiano, Delia Chillura Martino, Giosuè Costa, Francesca D'Anna, Cosimo Gianluca Fortuna, Emilia Furia, Massimiliano Gaeta, Chiara Gangemi, Ottavia Giuffrè, Giuseppa Ida Grasso, Annamaria Martorana, Patrizia Mazzei, Giuseppe Musumarra, Antonio Palumbo Piccionello, Nino Russo, Maria Zappalà

Comitato Organizzatore

Francesca D'Anna (Presidente), Delia Chillura Martino, Annamaria Martorana, Paola Marzullo, Antonio Palumbo Piccionello, Carla Rizzo

Email: scisicilia.unipa@gmail.com

Editorial composition and graphic: Palermo University Press

Copyright: University of Palermo

ISBN (print): 978-88-5509-002-5

ISBN (online): 978-88-5509-004-9

Con il patrocinio di



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DI PALERMO



DIPARTIMENTO DI SCIENZE E TECNOLOGIE
BIOLOGICHE CHIMICHE E FARMACEUTICHE (STERICEF)



DIFC

OCF

ORDINE INTERP.LE
DEI CHIMICI E FISICI
DELLA SICILIA

golden sponsor



SHIMADZU

Excellence in Science

silver sponsor

5Pascal

altri sponsor

BIOGENERICA
Scientific Laboratory Supplies

BÜCHI

DASITGROUP

CARLO ERBA
LABORATORIO

NOVAELEMENTS®

Programma

VENERDI' 1 MARZO 2019

8.30 **Registrazione**

9.30 **Saluti**

Presiede: Silvestre Buscemi

10.00-10.40 **PL1** *Derivati multifunzionali di cicloestrine: dai monomeri ai nanosistemi*

Graziella Vecchio, Università degli Studi di Catania

Presiede: Maurizio Bruno

10.40-10.55 **IL1** *La fondazione Ri.MED – il polo mediterraneo per le biotecnologie e la ricerca biomedica*

Alessandro Padova, Fondazione Ri.MED, Palermo

10.55-11.10 **OC1** *Nanotubi di allosite e Laponite: nuovi sistemi per la veicolazione della cartogenina*

Marina Massaro, Università degli Studi di Palermo

11.10-11.25 **OC2** *Metodologie da stampa a getto d'inchiostro per la realizzazione di substrati SERS*

Giuseppe Arrabito, Università degli Studi di Palermo

11.25-11.45 **Coffee Break**

Presiede: Michelangelo Gruttadauria

11.45-12.25 **PL2** *Pd/Fe₃O₄ as an efficient heterogeneous catalyst for the reductive upgrading of cellulose, hemicellulose, lignin, and their derived molecules*

Francesco Mauriello, Università Mediterranea di Reggio Calabria

Presiede: Maria Zappalà

12.25-12.40 **IL2** *La ricerca industriale nel campo dei fertilizzanti*

Edoardo Vaccaro, R&S, Mugavero

12.40-12.55 **OC3** *Interesterificazione degli oli vegetali come metodica alternativa per la produzione di Biodiesel*

Marco Russo, ISMN-CNR, Palermo

12.55-13.10 **OC4** *Analisi proteomica della frazione metabolica di grani antichi e moderni: un confronto qualitativo e quantitativo*

Antonella Di Francesco, Università degli Studi di Catania

VENERDI' 1 MARZO 2019

13.10-14.00 **Pranzo**

14.00-15.00 **Poster session e visita Museo di Chimica**

Presiede: Marirosa Toscano

15.00-15.40 **PL3** *Amminoacidi e peptidi metilati all'azoto*
Antonella Leggio, Università della Calabria

Presiede: Giuseppe Musumarra

15.40-15.55 **IL3** *REACH a scuola: esperienze di comunicazione scientifica.*
Carmelo Colombo, I.T.I.S. E. Torricelli, Sant'Agata Militello

15.55-16.10 **OC5** *LP2 e 2S-LP2: agonisti biased dual target MOR/DOR nel trattamento del dolore cronico*
Lorella Pasquinucci, Università degli Studi di Catania

16.10-16.25 **OC14** *Un modello realistico per visualizzazioni in didattica*
Antonella Di Vincenzo, Università degli Studi di Palermo

16.25-16.40 **OC7** *Lead optimization di sistemi[1,2]ossazolo[5,4-e]isoidolici*
Marilia Barreca, Università degli Studi di Palermo

16.40-17.00 **Coffee Break**

Presiede: Renato Noto

17.00-17.15 **OC8** *Synthesis of novel 1,2,4-oxadiazole topsentin analogs with antitumor activity*
Daniela Carbone, Università degli Studi di Palermo

17.15-17.30 **OC9** *Computational studies on antiviral targets: drug resistance mechanism and rational drug design*
Isabella Romeo, Università degli Studi Magna Græcia di Catanzaro

17.30-17.45 **OC10** *Influenza del N-sostituente della (-)-cis-N-Normetazocina nella modulazione del profilo funzionale al MOR, DOR e KOR: da agonista ad antagonista attraverso ligandi misti agonisti/antagonisti*
Rita Turnaturi, Università degli Studi di Catania

17.45-18.15 **OFC** *Un'avventura di 44 anni a UNIPA*
Girolando Cirrincione, Università degli Studi di Palermo

18.15 **Sigilli**

18.30 **Assemblea soci - Premiazione Poster**

20.30 **Cena sociale**

SABATO 2 MARZO 2019

Presiede: Angelo Liguori

- 9.00-9.40 **PL4** *Target-based molecules and delivery vehicles for microbial infections and malignancies*
Nicola Micale, Università degli Studi di Messina

Presiede: Girolamo Cirrincione

- 9.40-9.55 **IL4** *La professione del chimico e le sfide del futuro*
Vincenzo Nicoli, Presidente Ordine Interprovinciale dei Chimici e dei Fisici della Sicilia
- 9.55-10.10 **OC11** *Engineering of polylactic acids for biomedical applications*
Serena M. Torcasio, Università degli Studi di Messina
- 10.10-10.25 **OC12** *La modellistica molecolare applicata ai recettori Sigma-1 e Sigma-2: un excursus*
Giuseppe Floresta, Università degli Studi di Catania
- 10.25-10.40 **OC13** *Studio di speciazione di un legante 3-idrossi-4-piridinonico in presenza di un catione metallico di interesse biologico*
Anna Irto, Università degli Studi di Messina
- 10.40-10.55 **OC6** *Studio di tannini idrolizzabili quali potenziali agenti antidiabetici*
Nunzio Cardullo, Università degli Studi di Catania
- 10.55-11.15 **Coffee Break**

Presiede: Stefana Milioto

- 11.15-11.30 **OC15** *Cucurbit[7]uril: sintesi assistita da stampi molecolari ed applicazioni nelle reazioni di cicloaddizione 1,3-dipolare*
Vincenzo Patamia, Università degli Studi di Catania
- 11.30-11.45 **OC16** *Supramolecular nanoassemblies based on hyaluronic acid and polymeric cyclodextrins as therapeutic platforms*
Annalaura Cordaro, Università degli Studi di Messina
- 11.45-12.00 **OC17** *Sintesi e studio fotofisico di sistemi Eu@POSS: controllo dell'emissione attraverso isomeria cis-trans.*
Valerio Cinà, Università degli Studi di Palermo
- 12.00-12.15 **OC18** *Foto-reattori a membrana per la valorizzazione del CO₂*
Francesca R. Pomilla, Università della Calabria
- 12.15-12.30 **OC19** *Archaeological metal treasures from sicilian seabed: the studies*
Francesco Armetta, Università di Camerino
- 12.30-13.00 **OTP** *Cannizzaro, Oddo, Perrier: tre contributi "palermitani" alla Tabella Periodica.*
Roberto Zingales, Università degli Studi di Palermo

13.00 **Saluti**

Conferenze Plenarie

Derivati multifunzionali di ciclodestrine: dai monomeri ai nanosistemi

GRAZIELLA VECCHIO

Dipartimento di Scienze Chimiche, Università di Catania, Viale A. Doria 6, 95125, Catania

e-mail gr.vecchio@unict.it

Le ciclodestrine, oligosaccaridi ciclici del glucosio, sono caratterizzate da una struttura rigida a tronco di cono che delimita una cavità idrofobica chirale, nella quale possono essere incapsulate una vasta gamma di molecole.¹ L'inclusione nella cavità ciclodestrinica permette di modulare alcune proprietà della molecola ospite quali la solubilità, la stabilità, la reattività, le proprietà organolettiche. Sulla base di queste caratteristiche le ciclodestrine sono state utilizzate dall'industria agroalimentare, cosmetica, farmaceutica, tessile.²

La possibilità di funzionalizzare le unità glucosidiche ha portato alla coniugazione con le ciclodestrine di una varietà di molecole, realizzando sistemi multifunzionali organici e inorganici con nuove proprietà chimico-fisiche, ampiamente studiati come nanocavità terapeutiche, sistemi biomimetici, recettori molecolari, sensori.^{3,4}

Negli ultimi anni, in relazione all'interesse per le proprietà dei nanosistemi, le ciclodestrine sono state utilizzate per la preparazione di una varietà di sistemi supramolecolari e di nanoparticelle polimeriche o ibride. Tra questa varietà di nanosistemi, spesso studiati per il trasporto di farmaci o di acidi nucleici, sono stati sviluppati dei profarmaci polimerici, attualmente in fase clinica II sull'uomo.⁵

In questa presentazione, attraverso una selezione di sistemi, saranno descritte le potenzialità delle ciclodestrine in ambito chimico e biologico che indirizzano verso la progettazione di nuovi sistemi multifunzionali.

Bibliografia

¹ Jansook, P.; Ogawa, N.; Loftsson, T. *Int. J. Pharm.* **2018**, *535*, 272–284.

² Sliwa W.; Girek T. *Cyclodextrins: Properties and Applications*, 2017, Wiley

³ Oliveri, V.; Vecchio, G. *Future Med. Chem.* **2018**, *10*, 663–677.

⁴ Oliveri, V.; Vecchio, G. *Chem. - An Asian J.* **2016**, *11*, 1648–1657.

⁵ Shelley, H.; Babu, R. J. *J. Pharm. Sci.* **2018**, *107*, 1741–1753.

Pd/Fe₃O₄ as an efficient heterogeneous catalyst for the reductive upgrading of Cellulose, Hemicellulose, Lignin, and Their Derived Molecules

FRANCESCO MAURIELLO,^A EMILIA PAONE,^A BIANCA GUMINA,^B CLAUDIA ESPRO.^B

^a *Dipartimento di Ingegneria Civile, dell'Energia, dell'Ambiente e dei Materiali, Università Mediterranea di Reggio Calabria, Via Graziella Loc. Feo di Vito, 89122, Reggio Calabria*

^b *Dipartimento di Ingegneria, Università di Messina, Contrada di Dio - Vill. S. Agata, 98166, Messina*
e-mail francesco.mauriello@unirc.it

Modern chemical industry is facing the big challenge of overcoming its historical dependence on fossil resources by reconciling the economic recovery with the protection of environment and the reduction of greenhouse gas emissions.

To replace fossil-derived fuels and chemicals, the resources must be renewable, of sufficient abundance and not in competition with agricultural land and food production. Lignocellulosic biomasses are abundant and inedible resources that can be easily obtainable also from agricultural residues and waste [1,2]. At present, the most adopted technologies for the catalytic upgrading of waste lignocellulosic feedstocks generally require the separation of lignocellulose in its key constituents (cellulose, hemicellulose and lignin). Cellulose and hemicellulose allow the production of C5-C6 sugars that can be easily converted into aliphatic acids, ethers, esters, polyols, and alcohols, while lignin is a source of aromatic compounds.

In order to lower the oxygen content in cellulose, hemicellulose, and lignin - as well as in their relative derived molecules - three different chemical ways can be followed: (i) the removal of small molecules of oxidized carbon (CO₂, formaldehyde, and formic acid), (ii) the elimination of water through dehydration processes, and (iii) the direct “lysis” of the C–O bond by molecular H₂ with the concurrent formation of a molecule of water.

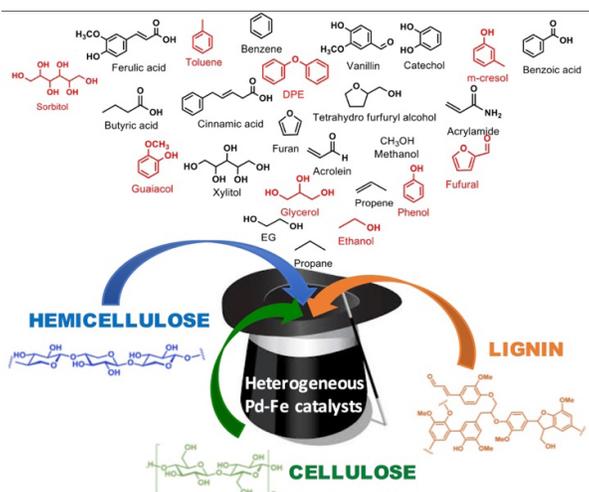
Hydrogenolysis is a very well-known reaction in which carbon–carbon or carbon–heteroatom bonds are cleaved, generally in the presence of a homogeneous or heterogeneous catalyst, that has been efficiently adopted for the reduction of the oxygen content in lignocellulosic components and in their derived platform chemicals [3]. At the same time, the catalytic transfer hydrogenation (CTH) reaction has emerged as an alternative hydrogenating method to the conventional H₂ method for the reductive upgrading of lignocellulosic biomasses [4, 5].

In this contribution we present an overview of heterogeneous bimetallic Pd-Fe catalysts in the C–C and C–O cleavage of platform molecules such as

C2–C6 polyols, furfural, phenol derivatives and aromatic ethers that are all easily obtainable from renewable cellulose, hemicellulose and lignin.

The interaction between palladium and iron affords bimetallic Pd-Fe sites (ensemble or alloy) that were found to be very active in several sustainable reactions including hydrogenolysis, catalytic transfer hydrogenolysis (CTH) and aqueous phase reforming (APR) that will be highlighted.

Figura 1. Pd/Fe₃O₄ as an efficient heterogeneous catalyst for the reductive upgrading Cellulose, Hemicellulose, Lignin, and Their Derived Molecules



Bibliografia

- ¹ Besson, M.; Gallezot, P.; Pinel, C.; *Chemical Reviews*, **2014**, 114, 1827.
- ² Xu, C.; Arancon, R.A.D.; Labidi, J.; Luque, R.; *Chemical Society Reviews*, **2014**, 43, 7485
- ³ Ruppert, M.A.; Weinberg, K.; Palkovits, R.; *Angewandte Chemie International Edition*, **2012**, 51, 2564
- ⁴ Gilkey, M.J.; Bingjun, E.X.; *ACS Catalysis*, **2016**, 6, 1420
- ⁵ Espro, C.; Gumina, B.; Szumelda, T.; Paone, E.; Mauriello, F.; *Catalysts*, **2018**, 8, 313.

Amminoacidi e peptidi metilati all'azoto

ANTONELLA LEGGIO

*Dipartimento di Farmacia e Scienze della Salute e della Nutrizione,
Università della Calabria, Edificio Polifunzionale 87036, Arcavacata di
Rende (CS)*

e-mail antonella.leggio@unical.it

I peptidi regolano un'ampia gamma di processi fisiologici e interagiscono con numerosi bersagli biologici implicati in diverse patologie, fornendo in tal modo una vasta opportunità per applicazioni biomediche. Il potenziale terapeutico dei peptidi ha attirato un crescente interesse da parte dell'industria farmaceutica per lo sviluppo di nuovi farmaci. Come farmaci i peptidi mostrano elevata selettività e bassa tossicità; tuttavia, presentano scarsa biodisponibilità e bassa stabilità in condizioni fisiologiche, limitando così il loro utilizzo come farmaci commerciali. Al fine di superare tali limiti, sono state individuate diverse strategie sintetiche per l'ottenimento di peptidi modificati. Una delle tecniche utilizzate per migliorare le proprietà farmacocinetiche dei peptidi è la *N*-metilazione dei legami ammidici. La *N*-metilazione, attraverso il controllo conformazionale e l'aumento di idrofobicità, conferisce stabilità metabolica ai peptidi bioattivi. L'interessante attività biologica dei peptidi *N*-metilati ha incoraggiato lo sviluppo di varie procedure sintetiche per la preparazione di *N*-metil-amminoacidi e per il loro inserimento in catene peptidiche naturali.¹ Il nostro gruppo di ricerca ha contribuito in questo settore sviluppando nuove strategie di sintesi stereoselettive di amminoacidi e peptidi *N*-metilati.² Le metodologie sviluppate si basano sull'individuazione di una procedura semplice ed efficiente per la *N*-metilazione in soluzione e in fase solida di α -amminoacidi. Tale procedura si basa sull'utilizzo del diazometano come agente metilante e del gruppo *p*-nitrobenzensolfonile (nosile) come gruppo protettore della funzione amminica.

Verranno illustrati esempi rappresentativi delle metodologie individuate.

Bibliografia

¹ Sharma, A., Kumar, A.; Abdel Monaim, S. A. H.; Jad, Y. E.; El-Faham, A.; de la Torre, B. G.; Albericio, F. *Biopolymers*, **2018**, e23110.

² a) Di Gioia, M. L.; Leggio, A.; Le Pera, A.; Liguori, A., Napoli, A.; Siciliano, C.; Sindona, G. *J. Org. Chem.*, **2003**, 68, 7416.; b) Di Gioia, M. L.; Leggio, A.; Liguori, A. *J. Org. Chem.* **2005**, 70, 3892; c) Leggio, A.; Belsito, E. L.; De Marco R.; Liguori, A.; Perri, F.; Viscomi M. C. *J. Org. Chem.*, **2010**, 75, 1386; d) Di Gioia, M. L.; Leggio, A.; Liguori, A.; Perri, F. *J. Org. Chem.*, **2007**, 72, 3723.

Target-Based Molecules and Delivery Vehicles for Microbial Infections and Malignancies

NICOLA MICALE

Dipartimento di Scienze Chimiche, Biologiche, Farmaceutiche ed Ambientali, Università degli Studi di Messina, Viale F. Stagno D'Alcontres 31, 98166, Messina
e-mail nmicale@unime.it

Target-based therapies continue to be key components in the treatment of microbial infections and malignancies. In this frame, our interest is currently pointed towards the target-based drug design and synthesis of novel protease inhibitors to tackle malaria¹ and leishmaniasis^{2,3}, as well as novel inhibitors of proteins involved in the tumor pathogenesis (i.e. proteasome⁴ and HDAC), and HIV inhibitors⁵.

Besides, the efficacy of the chemotherapeutic agents relies on the ability of the active substances to reach their site of action with the right concentration giving at the intended tissue or cellular level. In this regard, the use of nanotechnology to improve treatment efficacy and reduce side effects is central to nanomedicine.

In our ongoing search in this fields, drug delivery systems have been developed to improve the solubility, bioavailability and efficacy of commercial drugs (e.g. pentamidine)^{6,7} and newly synthesized compounds (e.g. metal complexes).

Bibliografia

- ¹ Micale, N.; Cinellu, M. A.; Maiore, L., *et al.*, *J. Inorg. Biochem.*, **2011**, 105, 1576.
- ² Scala, A.; Micale, N.; Piperno, A., *et al.*, *RSC Adv.*, **2016**, 6, 30628.
- ³ Scala, A.; Rescifina, A.; Micale, N., *et al.*, *Chem. Biol. Drug Des.*, **2018**, 91, 597.
- ⁴ Micale, N.; Schirmeister, T.; Ettari, R., *et al.*, *J. Inorg. Biochem.*, **2014**, 141, 79.
- ⁵ Scala, A.; Piperno, A.; Micale, N., *et al.*, *ACS Med. Chem. Lett.*, **2018**, DOI: 10.1021/acsmchemlett.8b00511.
- ⁶ Micale, N.; Piperno, A.; Mahfoudh, N., *et al.*, *RSC Adv.*, **2015**, 5, 95545.
- ⁷ Scala, A.; Piperno, A.; Micale, N., *et al.*, *J. Biomed. Mater. Res. B*, **2018**, 160B, 2778.

Comunicazioni orali su invito

La fondazione Ri.MED – il polo mediterraneo per le biotecnologie e la ricerca biomedica

ALESSANDRO PADOVA, PhD

*Fondazione Ri.MED, Via Bandiera 11, 90133, Palermo
e-mail apadova@fondazionerimed.com*

La Fondazione Ri.MED è stata istituita dalla Presidenza del Consiglio dei Ministri e si fonda su una partnership internazionale fra Governo Italiano, Regione Siciliana, Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR), University of Pittsburgh e University of Pittsburgh Medical Center (UPMC). L'obiettivo della Fondazione Ri.MED è promuovere, sostenere e condurre, direttamente o indirettamente, progetti e programmi di ricerca nel campo delle biotecnologie con particolare riferimento alla trasferibilità dei risultati nell'area biomedica. In particolare, Obiettivo di Ri.MED è promuovere e sostenere lo SVILUPPO DEL SETTORE BIOTECNOLOGICO in SICILIA e nel SUD d'ITALIA per essere all'avanguardia in questo settore a livello internazionale



Il seminario offrirà una panoramica della missione, del portfolio progetti della Fondazione e del suo posizionamento nel settore Life Science con particolare riferimento ad approcci di Ricerca e Sviluppo di Terapie Innovative.

La ricerca industriale nel campo dei fertilizzanti

EDOARDO VACCARO ^A RICCARDO VACCARO ^A

^a *R&S, Mugavero, Via: ss 113 km 201, Cap 90010, Città: Campofelice di Roccella (PA)*

e-mail (edoardo.vaccaro@gmail.com)

La Mugavero si occupa della produzione e della commercializzazione, di fertilizzanti e prodotti per la nutrizione vegetale. Nasce nel 1959, per la commercializzazione dei primi prodotti chimici per l'agricoltura (Montecatini e Montedison), oggi esporta in più di quaranta paesi, principalmente in Medio Oriente e nel bacino del mediterraneo. La società, negli anni ha investito nella ricerca e nello sviluppo di nuovi prodotti, cercando di soddisfare le esigenze degli agricoltori e del mercato.

Un'innovazione recente, nel campo dell'agricoltura, è quella che riguarda l'utilizzo di microrganismi, molte ricerche hanno evidenziato l'importanza del microbiota, nello sviluppo e nella resistenza agli stress abiotici e biotici, delle piante. In questi anni è nato il termine **bio-fertilizzante**, prodotto, contenente uno o più microrganismi (funghi micorrizici, batteri), in grado di formare interazioni simbiotiche con la pianta, favorendo l'assorbimento degli elementi nutritivi principali (NPK), e secondari (Mg Ca Fe S), o in grado di produrre PGP (plant growth promotion).

La società sta sviluppando un progetto con **CNR-IBBR** e **UNIPA-STE-BICEF**, al fine di sviluppare nuovi prodotti provenienti da dei ceppi, produttori di acido indolacetico e altre auxine.

Uno degli ultimi prodotti sviluppati all'interno della nostra azienda è un **Interruttore di dormienza**, La dormienza è lo stato fisiologico in cui si trova un seme o una gemma che, pur essendo in condizioni favorevoli alla germinazione, è incapace di farlo. In natura l'uscita dalla dormienza richiede una prolungata esposizione a temperature relativamente basse (< 7 °C), l'**Interruttore di dormienza** è una sostanza che applicata alle piante o ai semi consente di modificare i processi metabolici determinando l'uscita dalla dormienza e di conseguenza la germinazione. Fino a dieci anni fa l'unico l'interruttore della dormienza utilizzato era la cianammide (**Dormex**), ma a causa della tossicità sull'operatore ne fu vietato l'impiego in agricoltura in Europa. Il prodotto da noi sviluppato oltre ad essere sicuro per l'operatore ha effetti simili alla cianammide, in particolare i test preliminari hanno evidenziato che i campioni trattati, presentano profili di espressione correlati a pathways coinvolte nell'uscita dalla dormienza.

REACH a scuola: esperienze di comunicazione scientifica

CARMELO COLOMBO⁴

*^a I.T.I.S. E. Torricelli, Via Vallone Posta, 98076, Sant'Agata Militello(ME).
e mail carmelo.colombo@itisetorricelli.it*

Attività didattica di ricerca-intervento avente per oggetto i rischi per la salute e per l'ambiente derivanti dall'esposizione alle sostanze chimiche contenute nei prodotti di uso comune e come target di riferimento gli studenti di una terza classe di scuola superiore di II grado. L'attività è stata strutturata principalmente al fine di rilevare il livello di informazione/conoscenza della popolazione relativo al tema del regolamento REACH e, soprattutto, come potesse variare a seguito della realizzazione di una campagna di informazione su tali tematiche. Si persegue un duplice obiettivo, uno cognitivo quale la percezione del rischio chimico e l'altro pratico-operativo attraverso la predisposizione, l'attuazione e la valutazione di efficacia di uno specifico intervento informativo.



Figura 1

A tal fine, è certamente di vitale importanza elaborare e diffondere contenuti informativi chiari e corretti, in grado di essere recepiti dal maggior numero di persone possibile.

In ambito scolastico le iniziative di comunicazione scientifica, come quella qui rappresentata, mirate alla condivisione di linguaggi e di contenuti informativi improntati sul rigore scientifico contribuiscono alla formazione di una consapevolezza critica sul tema in oggetto.

Bibliografia

Regolamento (CE) N. 1907/2006 del Parlamento Europeo e del Consiglio del 18 dicembre 2006,

Regolamento (CE) N. 1272/2008 del Parlamento Europeo e del Consiglio del 16 dicembre 2008,

ISPRA, Rapporto attività 2017 Sezione Sostanze Pericolose VLA-RTEC-TEC Marzo 2018,

Sostanze Chimiche-Ambiente e Salute, Bollettino di informazione Anno 4- numero 4 - 2013, Ministero dell'Ambiente,

Decataldo A., Fasanella A., Maggi M. La comunicazione del rischio chimico, Ed. Il riccio e la volpe.

Un'avventura di 44 anni a Unipa

GIROLAMO CIRRINCIONE

*Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biologiche, Chimiche e Farmaceutiche, Università di Palermo, Via Archirafi 32, 90123, Palermo
e-mail girolamo.cirrincione@unipa.it*

Le tematiche di ricerca affrontate lungo il mio cammino che va dagli anni '70 ad oggi, hanno subito una significativa evoluzione dovuta all'epocale cambiamento delle strategie riguardo lo sviluppo di farmaci degli ultimi 20-25 anni.

La mia attività di ricerca cominciava con lo studio della reattività di pirrolo, indolo e, più tardi, isoindolo, i cui derivati venivano utilizzati come "building blocks" per composti policiclici di interesse farmaceutico.

In quegli anni l'approccio alla Chimica Farmaceutica era piuttosto casuale, cioè la scoperta di un "lead" era dovuta talvolta alla "serendipity", cioè alla casualità o al cosiddetto "random approach". I composti chimici isolati venivano testati per valutarne varie e molteplici attività biologiche e solo in seguito a risultati particolarmente positivi nei confronti di determinati screenings, si procedeva alla loro modifica strutturale sintetizzando un enorme numero di derivati con sostituenti di caratteristiche diverse per cercare di cogliere possibili relazioni tra attività e struttura. In questo periodo, la scoperta del farmaco doveva necessariamente precedere quella del bersaglio e le interazioni farmaco-macromolecola erano frutto di una fortunata coincidenza e non certo di progettazione razionale.

I grandi progressi fatti dalla biologia e genetica molecolare, durante gli anni '90, hanno portato all'isolamento di molti recettori ed enzimi che rappresentano bersagli di farmaci ed hanno consentito che l'approccio casuale potesse essere soppiantato da un approccio razionale che introduce elementi di design. L'attuale drug design assistito dal computer utilizza le coordinate dei raggi X, scaricabili da banche dati, adesso accessibili a tutti, riguardanti le macromolecole considerate recettori e, attraverso programmi di molecular modeling è possibile individuare quali profili strutturali deve avere una molecola per meglio interagire col recettore. In questo modo si hanno indicazioni per sintetizzare un numero di composti nettamente inferiore a quanto si faceva qualche anno addietro con una maggiore possibilità di avere strutture biologicamente attive. In altre parole, oggi la scoperta del bersaglio è di importanza fondamentale per avviare il complesso processo di drug discovery.

La professione del chimico e le sfide del futuro

DOTT. CHIMICO VINCENZO NICOLI

Presidente Ordine Interprovinciale dei Chimici e dei Fisici della Sicilia

La Legge 3\2018 conosciuta da tutti come Legge Lorenzin ha riconosciuto la professione del chimico e del fisico come professioni sanitarie dando il giusto rilievo al ruolo primario che queste due figure professionali svolgono nel miglioramento delle condizioni di salute e benessere dell'uomo e dell'ambiente che lo ci circonda.

Il chimico interviene nella sicurezza sui luoghi di lavoro valutando il rischio di esposizione professionale a sorgenti tossiche, a sorgenti ionizzanti, a polveri e fibre, ecc., contribuisce al miglioramento, allo sviluppo e all'innovazione dei processi produttivi industriali, al miglioramento delle filiere agroalimentari, al controllo di qualità dei prodotti agricoli garantendo la sicurezza alimentare.

Il chimico è una figura chiave nella realizzazione di nuovi prodotti sostenibili, nella reintroduzione degli scarti o dei rifiuti o dei loro derivati nuovamente in una filiera produttiva generando quella che oggi è conosciuta come economia circolare.

Il riconoscimento delle funzioni sanitarie della professione del chimico e del fisico evidenzia la centralità che le professioni tecniche, ora sanitarie, rivestono per la collettività e la crescita del Paese.

Dall'ultimo rapporto di Federchimica, le imprese e le industrie chimiche investono ogni anno oltre il 2% del proprio fatturato in ricerca e sviluppo oltre che in sicurezza e formazione di professionisti ed operatori da impiegare nelle proprie imprese. Questo perché una chimica competitiva genera e distribuisce benessere sul territorio e sul Paese stesso.

Un fattore determinante e necessario dello sviluppo economico e sociale è, certamente, la coesione. Il nostro futuro se ci pensiamo bene è legato alla fattiva collaborazione che sapremo realizzare tra ricerca universitaria, formazione dei giovani chimici, industria e professione tecnica.



Cannizzaro, Oddo, Perrier: tre contributi “palermitani” alla Tabella Periodica.

ROBERTO ZINGALES

email robertozingales@outlook.it

Nell’Anno Internazionale della Tabella periodica, è giusto ricordare il contributo che tre chimici, che hanno insegnato e lavorato presso l’Università di Palermo, hanno fornito alla individuazione (Cannizzaro), rielaborazione (Oddo), completamento (Perrier) del sistema periodico degli elementi (1869).

Stanislao Cannizzaro (1826 – 1910), enunciando la legge degli atomi, contribuì a risolvere il problema della corretta determinazione dei pesi atomici, poi scelti da Mendeleev (1834 – 1907) come criterio ordinatore degli elementi.

Nuova classificazione periodica degli elementi di G. Oddo (Pat. atomi n.º 1119-20).

METALLICOIDI										M E T A L L I																	
Gruppi	V	IV	III	B	II	I	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
Periodi																											
I																											
II																											
III																											
IV																											
V																											
VI																											
VII																											
VIII																											
IX																											
X																											
XI																											
XII																											
XIII																											
XIV																											
XV																											
XVI																											
XVII																											
XVIII																											
XIX																											
XX																											
XXI																											
XXII																											
XXIII																											
XXIV																											
XXV																											
XXVI																											
XXVII																											
XXVIII																											
XXIX																											
XXX																											
XXXI																											
XXXII																											
XXXIII																											
XXXIV																											
XXXV																											
XXXVI																											
XXXVII																											
XXXVIII																											
XXXIX																											
XL																											
XL I																											
XL II																											
XL III																											
XL IV																											
XL V																											
XL VI																											
XL VII																											
XL VIII																											
XL IX																											
XL X																											
XL XI																											
XL XII																											
XL XIII																											
XL XIV																											
XL XV																											
XL XVI																											
XL XVII																											
XL XVIII																											
XL XIX																											
XL XX																											
XL XXI																											
XL XXII																											
XL XXIII																											
XL XXIV																											
XL XXV																											
XL XXVI																											
XL XXVII																											
XL XXVIII																											
XL XXIX																											
XL XXX																											
XL XXXI																											
XL XXXII																											
XL XXXIII																											
XL XXXIV																											
XL XXXV																											
XL XXXVI																											
XL XXXVII																											
XL XXXVIII																											
XL XXXIX																											
XL XL																											
XL XL I																											
XL XL II																											
XL XL III																											
XL XL IV																											
XL XL V																											
XL XL VI																											
XL XL VII																											
XL XL VIII																											
XL XL IX																											
XL XL X																											
XL XL XI																											
XL XL XII																											
XL XL XIII																											
XL XL XIV																											
XL XL XV																											
XL XL XVI																											
XL XL XVII																											
XL XL XVIII																											
XL XL XIX																											
XL XL XX																											
XL XL XXI																											
XL XL XXII																											
XL XL XXIII																											
XL XL XXIV																											
XL XL XXV																											
XL XL XXVI																											
XL XL XXVII																											
XL XL XXVIII																											
XL XL XXIX																											
XL XL XXX																											
XL XL XXXI																											
XL XL XXXII																											
XL XL XXXIII																											
XL XL XXXIV																											
XL XL XXXV																											
XL XL XXXVI																											
XL XL XXXVII																											
XL XL XXXVIII																											
XL XL XXXIX																											
XL XL XL																											
XL XL XL I																											
XL XL XL II																											
XL XL XL III																											
XL XL XL IV																											
XL XL XL V																											
XL XL XL VI																											
XL XL XL VII																											
XL XL XL VIII																											
XL XL XL IX																											
XL XL XL X																											
XL XL XL XI																											
XL XL XL XII																											
XL XL XL XIII																											
XL XL XL XIV																											
XL XL XL XV																											
XL XL XL XVI																											
XL XL XL XVII																											
XL XL XL XVIII																											
XL XL XL XIX																											
XL XL XL XX																											
XL XL XL XXI																											
XL XL XL XXII																											
XL XL XL XXIII																											
XL XL XL XXIV																											
XL XL XL XXV																											
XL XL XL XXVI																											
XL XL XL XXVII																											
XL XL XL XXVIII																											
XL XL XL XXIX																											
XL XL XL XXX																											
XL XL XL XXXI																											
XL XL XL XXXII																											
XL XL XL XXXIII																											
XL XL XL XXXIV																											
XL XL XL XXXV																											
XL XL XL XXXVI																											
XL XL XL XXXVII																											
XL XL XL XXXVIII																											
XL XL XL XXXIX																											
XL XL XL XL																											
XL XL XL XL I																											
XL XL XL XL II																											
XL XL XL XL III																											
XL XL XL XL IV																											
XL XL XL XL V																											
XL XL XL XL VI																											
XL XL XL XL VII																											
XL XL XL XL VIII																											
XL XL XL XL IX																											
XL XL XL XL X																											
XL XL XL XL XI																											
XL XL XL XL XII																											
XL XL XL XL XIII																											
XL XL XL XL XIV																											
XL XL XL XL XV																											
XL XL XL XL XVI																											
XL XL XL XL XVII																											
XL XL XL XL XVIII																											
XL XL XL XL XIX																											
XL XL XL XL XX																											
XL XL XL XL XXI																											
XL XL XL XL XXII																											
XL XL XL XL XXIII																											
XL XL XL XL XXIV																											
XL XL XL XL XXV																											
XL XL XL XL XXVI																											
XL XL XL XL XXVII																											
XL XL XL XL XXVIII																											
XL XL XL XL XXIX																											
XL XL XL XL XXX																											
XL XL XL XL XXXI																											
XL XL XL XL XXXII																											
XL XL XL XL XXXIII																											
XL XL XL XL XXXIV																											
XL XL XL XL XXXV																											
XL XL XL XL XXXVI																											
XL XL XL XL XXXVII																											
XL XL XL XL XXXVIII																											
XL XL XL XL XXXIX																											
XL XL XL XL XL																											
XL XL XL XL XL I																											
XL XL XL XL XL II																											
XL XL XL XL XL III																											
XL XL XL XL XL IV																											
XL XL XL XL XL V																											
XL XL XL XL XL VI																											
XL XL XL XL XL VII																											
XL XL XL XL XL VIII																											
XL XL XL XL XL IX																											
XL XL XL XL XL X																											
XL XL XL XL XL XI																											
XL XL XL XL XL XII																											
XL XL XL XL XL XIII																											
XL XL XL XL XL XIV																											
XL XL XL XL XL XV																											
XL XL XL XL XL XVI																											
XL XL XL XL XL XVII																											
XL XL XL XL XL XVIII																											
XL XL XL XL XL XIX																											
XL XL XL XL XL XX																											
XL XL XL XL XL XXI																											
XL XL XL XL XL XXII																											
XL XL XL XL XL XXIII																											
XL XL XL XL XL XXIV																											
XL XL XL XL XL XXV																											
XL XL XL XL XL XXVI																											
XL XL XL XL XL XXVII																											
XL XL XL XL XL XXVIII																											
XL XL XL XL XL XXIX																											
XL XL XL XL XL XXX																											
XL XL XL XL XL XXXI																											
XL XL XL XL XL XXXII																											
XL XL XL XL XL XXXIII																											
XL XL XL XL XL XXXIV																											
XL XL XL XL XL XXXV																											
XL XL XL XL XL XXXVI																											
XL XL XL XL XL XXXVII																											
XL XL XL XL XL XXXVIII																											
XL XL XL XL XL XXXIX																											
XL XL XL XL XL XL																											
XL XL XL XL XL XL I																											
XL XL XL XL XL XL II																											
XL XL XL XL XL XL III																											
XL XL XL XL XL XL IV																											
XL XL XL XL XL XL V																											
XL XL XL XL XL XL VI																											
XL XL XL XL XL XL VII																											
XL XL XL XL XL XL VIII																											
XL XL XL XL XL XL IX																											
XL XL XL XL XL XL X																											
XL XL XL XL XL XL XI																											
XL XL XL XL XL XL XII																											
XL XL XL XL XL XL XIII																											
XL XL XL XL XL XL XIV																											
XL XL XL XL XL XL XV																											
XL XL XL XL XL XL XVI																											
XL XL XL XL XL XL XVII																											
XL XL XL XL XL XL XVIII																											
XL XL XL XL XL XL XIX																											
XL XL XL XL XL XL XX																											
XL XL XL XL XL XL XXI																											
XL XL XL XL XL XL XXII																											
XL XL XL XL XL XL XXIII																											
XL XL XL XL XL XL XXIV																											
XL XL XL XL XL XL XXV																											
XL XL XL XL XL XL XXVI																											
XL XL XL XL XL XL XXVII																											
XL XL XL XL XL XL XXVIII																											
XL XL XL XL XL XL XXIX																											
XL XL XL XL XL XL XXX																											
XL XL XL XL XL XL XXXI																											
XL XL XL XL XL XL XXXII																											
XL XL XL XL XL XL XXXIII																											
XL XL XL XL XL XL XXXIV																											
XL XL XL XL XL XL XXXV																											
XL XL XL XL XL XL XXXVI																											
XL XL XL XL XL XL XXXVII																											
XL XL XL XL XL XL XXXVIII																											
XL XL XL XL XL XL XXXIX																											
XL XL XL XL XL XL XL																											
XL XL XL XL XL XL XL I																											
XL XL XL XL XL XL XL II																											
XL XL XL XL XL XL XL III																											
XL XL XL XL XL XL XL IV																											
XL XL XL XL XL XL XL V																											
XL XL XL XL XL XL XL VI																											
XL XL XL XL XL XL XL VII																											
XL XL XL XL XL XL XL VIII																											
XL XL XL XL XL XL XL IX																											
XL XL XL XL XL XL XL X																											
XL XL XL XL XL XL XL XI																											
XL XL XL XL XL XL XL XII																											
XL XL XL XL XL XL XL XIII																											
XL XL XL XL XL XL XL XIV																											
XL XL XL XL XL XL XL XV																											
XL XL XL XL XL XL XL XVI																											
XL XL XL XL XL XL XL XVII																											
XL XL XL XL XL XL XL XVIII																											
XL XL XL XL XL XL XL XIX																											
XL XL XL XL XL XL XL XX																											
XL XL XL XL XL XL XL XXI																											
XL XL XL XL XL XL XL XXII																											
XL XL XL XL XL XL XL XXIII																											
XL XL XL XL XL XL XL XXIV																											
XL XL XL XL XL XL XL XXV																											
XL XL XL XL XL XL XL XXVI																											
XL XL XL XL XL XL XL XXVII																											
XL XL XL XL XL XL XL XXVIII																											
XL XL XL XL XL XL XL XXIX																											
XL XL XL XL XL XL XL XXX																											
XL XL XL XL XL XL XL XXXI																											
XL XL XL XL XL XL XL XXXII																											
XL XL XL XL XL XL XL XXXIII																											
XL XL XL XL XL XL XL XXXIV																											
XL XL XL XL XL XL XL XXXV																											
XL XL XL XL XL XL XL XXXVI																											
XL XL XL XL XL XL XL XXXVII																											
XL XL XL XL XL XL XL XXXVIII																											
XL XL XL XL XL XL XL XXXIX																											
XL XL XL XL XL XL XL XL																											
XL XL XL XL XL XL XL XL I																											
XL XL XL XL XL XL XL XL II																											
XL XL XL XL XL XL XL XL III																											
XL XL XL XL XL XL XL XL IV																											
XL XL XL XL XL XL XL XL V																											
XL XL XL XL XL XL XL XL VI																											
XL XL XL XL XL XL XL XL VII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL VIII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL IX																											
XL XL XL XL XL XL XL XL X																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XI																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XIII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XIV																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XV																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XVI																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XVII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XVIII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XIX																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XX																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XXI																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XXII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XXIII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XXIV																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XXV																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XXVI																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XXVII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XXVIII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XXIX																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XXX																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XXXI																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XXXII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XXXIII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XXXIV																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XXXV																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XXXVI																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XXXVII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XXXVIII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XXXIX																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL I																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL II																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL III																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL IV																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL V																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL VI																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL VII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL VIII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL IX																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL X																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XI																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XIII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XIV																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XV																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XVI																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XVII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XVIII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XIX																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XX																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XXI																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XXII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XXIII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XXIV																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XXV																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XXVI																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XXVII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XXVIII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XXIX																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XXX																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XXXI																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XXXII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XXXIII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XXXIV																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XXXV																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XXXVI																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XXXVII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XXXVIII																											
XL XL XL XL XL XL XL XL XL XXXIX																											
XL																											
XL I																											
XL II																											
XL III																											
XL IV																											
XL V																											
XL VI																											
XL VII																											
XL VIII																											
XL IX																											
XL X																											
XL XI																											
XL XII																											

Comunicazioni orali

Nanotubi di allosite e Laponite: nuovi sistemi per la veicolazione della cartogenina

MARINA MASSARO,^A GABRIELLA BUSCEMI,^A LUCA ARISTA,^B GIUSEPPA BIDDECI,^{A,C} GIUSEPPE CAVALLARO,^D FRANCESCA D'ANNA,^A FRANCESCO DI BLASI,^C ANGELO FERRANTE,^E GIUSEPPE LAZZARA,^D CARLA RIZZO,^A GAETANO SPINELLI,^C THOMAS ULLRICH,^B SERENA RIELA^A

^a Dipartimento STEBICEF, Sez. Chimica, Università degli Studi di Palermo, Viale delle Scienze, Ed. 17, 90128 Palermo, Italy

^b Global Discovery Chemistry, Novartis Institutes for BioMedical Research, CH-4002 Basel, Switzerland

^c Istituto di Biomedicina ed Immunologia Molecolare - Consiglio Nazionale delle Ricerche, Via Ugo La Malfa 153, 90146 Palermo, Italy

^d Dipartimento di Fisica e Chimica, Università degli Studi di Palermo, Viale delle Scienze, Ed. 17, 90128 Palermo, Italy

^e Dipartimento Biomedico di Medicina Interna e Specialistica, Sezione di Reumatologia, Università degli Studi di Palermo, 90128, Palermo, Italy.
e-mail marina.massaro@unipa.it

I nanotubi di allosite (HNT), alluminosilicati naturali con formula generale $Al_2Si_2O_5(OH)_4 \cdot nH_2O$, sono ad oggi tra le più versatili argille usate in vari ambiti scientifici.¹ Essi sono minerali appartenenti al gruppo del caolino, che si presentano nella caratteristica forma tubolare cava avvolta. Grazie alla loro peculiare composizione chimica, gli HNT presentano una parziale carica negativa sulla superficie esterna e una positiva in quella interna. Tali cariche vengono sfruttate nell'interazione con macromolecole di interesse biologico al fine di sviluppare innovativi sistemi di veicolazione per il rilascio controllato di farmaci.

In questa comunicazione riportiamo dati preliminari inerenti la sintesi e caratterizzazione di un potenziale sistema *carrier* basato su nanotubi di allosite dispersi in una matrice di laponite, per il trasporto e il rilascio intra-articolare della cartogenina.

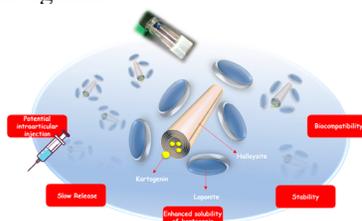


Figura 1.

Bibliografia

¹ Massaro, M.; Cavallaro, G.; Colletti, C.G.; Lazzara, G.; Milioto, S.; Noto, R.; RIELA, S. *J. Mater. Chem. B* **2018**, *6*, 3415.

Metodologie da stampa a getto d'inchiostro per la realizzazione di substrati SERS

CARMELO MICCICHÈ,^{AB} GIUSEPPE ARRABITO,^{AB} FRANCESCO AMATO,^{AB} GIANPIERO BUSCARINO,^{AB} SIMONPIETRO AGNELLO,^{AB} BRUNO PIGNATARO^{AB}

^aDipartimento di Fisica e Chimica, Università degli Studi di Palermo, V.le delle Scienze, 90128 Palermo, Italia.

^bAten Center, Università degli Studi di Palermo, Ed. 18, V.le delle Scienze, 90128 Palermo, Italia.

e-mail giuseppedomenico.arrabito@unipa.it

Uno degli argomenti di maggiore interesse della Surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS)¹ è il controllo del posizionamento su superficie degli “hot spots” – le zone interstiziali fra aggregati di particelle metalliche che producono un aumento locale del segnale Raman. I substrati SERS consistono tipicamente in una matrice di hot-spots ad alta densità sui quali volumi macroscopici (>1 μL) di molecole di analita sono disperse. Questo approccio porta ad una alta invasività ed una distribuzione non uniforme dell'analita a causa dei flussi capillari². In questo lavoro, viene sviluppata una nuova piattaforma SERS realizzata da stampa a getto d'inchiostro² in cui una miscela di un analita SERS (alizarina 10 μM) e nanoparticelle di Argento da 60 nm (AgNPs) è stampata sotto forma di gocce con volumi sulla scala dei picolitri² (vedere Figura 1).

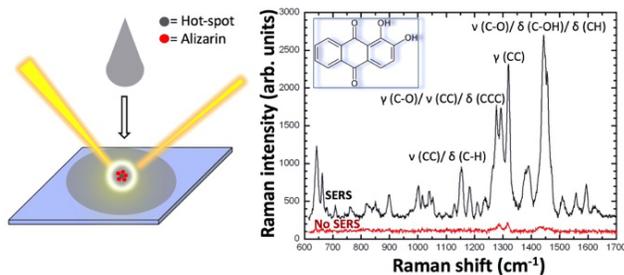


Figura 1. Schema della piattaforma e spettro SERS dell'analita Alizarina.

Le AgNPs formano spontaneamente degli aggregati che, dopo analisi AFM, risultano consistere di un monostato di Ag NPs comprendente in media circa 6 nanoparticelle. L'effetto SERS generato permette la detezione di poche molecole di alizarina e la determinazione accurata dell'enhancement dato dall'effetto SERS ($>10^4$).

Bibliografia

¹ Nie, S.; Emory, S. R.; *Science*, **1997**, 275, 1102.

² Miccichè, C.; Arrabito, G.; Amato, F.; Buscarino, G.; Agnello, S.; Pignataro, B.; *Anal. Methods*, **2018**, 10, 3215.

Interesterificazione degli oli vegetali come metodica alternativa per la produzione di Biodiesel

MARCO RUSSO, VALERIA LA PAROLA, ANNA MARIA VENEZIA, MARIA LUISA TESTA

Istituto per lo Studio dei Materiali Nanostrutturati, ISMN-CNR

Via Ugo La Malfa 153, 90146, Palermo

e-mail marco.russo@ismn.cnr.it

Le impellenti problematiche ambientali e le conseguenti restrizioni normative legate ai parametri di emissione nonché all'utilizzo di combustibili alternativi hanno spinto la ricerca verso lo sviluppo di processi innovativi per la produzione di biocombustibili derivati da risorse rinnovabili che non competano con la produzione agroalimentare. Nel panorama dei biocombustibili un ruolo di primo livello è occupato dal biodiesel. Sebbene si stiano sviluppando tecnologie innovative come il processo ecofining™ di ENI, ad oggi la principale metodica per la produzione di biodiesel è la transesterificazione di oli vegetali. Tale processo, da cui si ottiene il FAME biodiesel ad oggi miscelato in tutti i diesel commerciali, presenta diversi svantaggi, su tutti la produzione di glicerolo la cui separazione dal biodiesel ne incrementa i costi di produzione. Nel presente lavoro viene utilizzata una metodica alternativa quale l'interesterificazione, una reazione di scambio di acile tra i trigliceridi costituenti gli oli vegetali e un acetil estere.¹⁻² Tale reazione consente la contemporanea produzione di biodiesel e triacetilglicerolo che ne costituisce un additivo, inoltre l'utilizzo di catalizzatori acidi eterogenei rappresenta un ulteriore vantaggio consentendo anche l'utilizzo di oli vegetali esausti come materia prima. I test catalitici sono stati condotti utilizzando un trigliceride modello come il gliceriltriottanoato e acetato d'etile come donatore di acile in presenza di ossidi mesoporosi quali SiO₂, Al₂O₃ e TiO₂ funzionalizzati con gruppi solfonici. La conversione del gliceriltriottanoato in etil ottanoato e triacetilglicerolo è stata monitorata tramite analisi GC-MS. I risultati preliminari ottenuti hanno evidenziato una correlazione tra attività catalitica e caratteristiche sia strutturali che chimico-fisiche del catalizzatore.

Bibliografia

¹ Casas, A.; Ramos, M.J.; Perez, A. *Biomass and Bioenergy*, **2011**, 35, 1702.

² Interrante, L.; Bensaid, S.; Galletti, C.; Pirone, R.; Schiavo, B.; Scialdone, O.; Galla, A. *Fuel Processing Technology*, **2018**, 177, 336.

Analisi proteomica della frazione metabolica di grani antichi e moderni: un confronto qualitativo e quantitativo

ANTONELLA DI FRANCESCO,^a ROSARIA SALETTI,^a VINCENZO CUNSOLO,^a
VERA MUCCILLI,^a PASQUALE DE VITA,^b SALVATORE FOTI.^a

^a *Dipartimento di Scienze Chimiche, Università di Catania, Viale A. Doria 6, 95125, Catania*

^b *CREA Cereal Research Centre (CREA-CER), Foggia*
e-mail antonelladfrancesco@gmail.com

I cereali rappresentano gli alimenti di più largo consumo e sono dei costituenti di base dell'alimentazione umana. Il grano, grazie alla sua capacità di poter essere convertito in alimenti giornalmente consumati, è una importante risorsa nutritiva, ricca di fibre, carboidrati, proteine e vitamine. Tuttavia, il grano può causare una serie di reazioni avverse in soggetti predisposti quali celiachia, reazioni allergiche o la NCWS (non-celiac wheat sensitivity). Pertanto, negli ultimi anni è cresciuto notevolmente l'interesse per i prodotti senza glutine e per le varietà antiche di grano che, pur senza la base di dati scientifici, vengono generalmente considerate meglio tollerate rispetto alle odierne "varietà commerciali".¹ Lo scopo del presente lavoro è **quello di effettuare un confronto qualitativo e quantitativo, mediante le moderne tecniche di analisi proteomica**,² della frazione proteica solubile in soluzione salina (proteine metaboliche) di varietà di grano duro antiche (*Russello* e *Timilia reste bianche*) e moderne (*Simeto*). I risultati preliminari di tale studio hanno evidenziato una sostanziale similarità nella composizione qualitativa delle frazioni investigate. D'altra parte, l'analisi quantitativa delle proteine identificate mostra che numerose componenti sono differenzialmente espresse nelle varietà antiche rispetto alla varietà moderna *Simeto*.

Bibliografia

¹ Shewry. P.R.; Wheat, J. Exp. Bot., **2009**, 60, 1537.

² Cunsolo V., Muccilli V., Saletti R., Foti S.; J. Mass Spectrom., **2014**, 49, 768.

LP2 e 2S-LP2: agonisti *biased dual target* MOR/DOR nel trattamento del dolore cronico

LORELLA PASQUINUCCI,^A CARMELA PARENTI,^A SANTINA CHIECHIO,^A GIROLAMO CALÒ,^B ROSALBA PARENTI,^C NUNZIO VICARIO^C AND RITA TURNATURI^A

^a Dipartimento di Scienze del Farmaco, Università di Catania, Viale A. Doria, 6, 95125, Catania

^b Dipartimento di Scienze mediche, Università di Ferrara, Via Fossato di Mortara 17-19, 44121, Ferrara

^c Dipartimento di Scienze Biomediche e Biotecnologiche, Università di Catania, Viale A. Doria, 97, 95123, Catania
e-mail lpasquin@unict.it

Nel trattamento del dolore cronico una strategia alternativa è lo sviluppo di agonisti *dual target* per i recettori μ (MOR) e δ (DOR). Recentemente, abbiamo identificato un agonista *dual target* MOR/DOR, denominato LP2, caratterizzato da un'elevata affinità MOR ($K_i = 1.08$ nM) e DOR ($K_i = 6.6$ nM) e da un profilo agonista nei confronti di questi recettori ($IC_{50}^{MOR} = 21.5$ nM e $IC_{50}^{DOR} = 4.4$ nM). In vivo nel *tail flick test*, LP2 ha mostrato una potente azione analgesica di lunga durata ($ED_{50} = 0,9$ mg/kg ip) completamente antagonizzata dal naloxone.¹ Visto il profilo *dual target* MOR/DOR, LP2 è stato, quindi, valutato in un modello di dolore infiammatorio (Formalin test)² ed in un modello di dolore neuropatico indotto attraverso la legatura del nervo sciatico (CCI-rats). Per valutare il ruolo dello stereocentro nel sostituente all'azoto del nucleo 6,7-benzomorfanico, i diastereoisomeri 2R- e 2S- di LP2 sono stati sintetizzati. Rispetto a LP2, l'isomero 2S-LP2 ha mostrato un migliore profilo in vitro ($K_i^{MOR} = 0.5$ nM, $K_i^{DOR} = 2.59$ nM, $pEC_{50}^{MOR} = 8.33$, $pEC_{50}^{DOR} = 7.46$) ed in vivo ($ED_{50} = 0.6$ mg/kg ip nel *tail flick test*). Inoltre, nel *Bioluminescence resonance energy transfer (BRET) assay* LP2 e 2S-LP2 sono stati in grado di attivare preferenzialmente con elevata selettività funzionale la via della proteina G rispetto a quella della β -arrestin 2, comportandosi da *biased agonists* del MOR e soprattutto del DOR, un profilo questo dimostratosi efficace nella gestione delle condizioni di dolore cronico.

Bibliografia

¹ Pasquinucci, L.; Turnaturi, R.; Prezzavento, O.; Arena, E.; Aricò, G.; Georgoussi, Z.; Parenti, R.; Cantarella, G.; Parenti, C. *Bioorg Med Chem*, **2017**, 25, 4745.

² Pasquinucci, L.; Turnaturi, R.; Montenegro, L.; Caraci, F.; Chiechio, S.; Parenti, C. *EJP*, **2019**, 847, 97.

Studio di tannini idrolizzabili quali potenziali agenti antidiabetici

NUNZIO CARDULLO,^A VERA MUCCILLI,^A LUANA PULVIRENTI,^A ANAËLLE CORNU,^B LAURENT POUYSEGU,^B DENIS DEFFIEUX,^B STÉPHANE QUIDEAU,^B CORRADO TRINGALI,^A

^a *Dipartimento di Scienze Chimiche, Università degli Studi di Catania, Viale A. Doria 6, 95125, Catania*

^b *Univ. Bordeaux, ISM, CNRS-UMR 5255, 351 Cours de la Libération, 33405 Talence Cedex, Francia*
e-mail ncardullo@unict.it

Il diabete è una malattia cronica molto diffusa ai giorni nostri, caratterizzata da un aumento della concentrazione di zuccheri nel sangue (iperglicemia). Questa condizione può dipendere da una ridotta produzione di insulina o da una ridotta capacità dell'organismo di utilizzarla opportunamente e l'iperglicemia, se non controllata, può favorire l'insorgenza di complicanze croniche a livello di reni, retina, del sistema nervoso, del sistema cardiovascolare, ed altro.¹ L'acarbosio, uno dei farmaci antidiabetici presenti in commercio, agisce come inibitore dell' α -amilasi e dell' α -glucosidasi e di conseguenza rallenta la reazione di idrolisi dei carboidrati e l'assorbimento del glucosio. Alcuni effetti indesiderati dell'acarbosio hanno stimolato la ricerca di nuovi farmaci antidiabetici possibilmente privi di effetti collaterali. Diversi studi indicano che alcune famiglie di composti naturali, e in particolare quella dei polifenoli, includono numerose molecole con promettente attività di inibizione dell' α -glucosidasi e/o dell' α -amilasi;² alcuni studi recenti riguardano i tannini. In questo contesto si inserisce lo studio di 17 tannini idrolizzabili come potenziali inibitori di entrambi gli enzimi. I composti analizzati hanno mostrato un'elevata attività inibitoria dell' α -glucosidasi e un'inibizione da bassa a moderata dell' α -amilasi. Inoltre, misure di fluorescenza, dicroismo circolare e cinetica enzimatica sono state eseguite sui composti più attivi.

Bibliografia

¹ Zheng, Y.; Ley, S. H.; Hu, F. B. *Nature Reviews Endocrinology*, **2018**, 14, 88-98.

² Tundis, R.; Loizzo, M. R.; Menichini, F. *Mini-Reviews in Medicinal Chemistry*, **2010**, 10, 315-331.

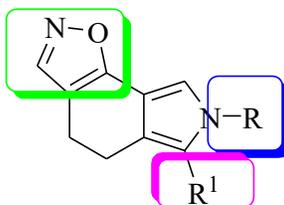
Lead optimization di sistemi [1,2]ossazolo[5,4-e]isoindolici

VIRGINIA SPANÒ, MARILIA BARRECA, ANNA CARBONE, ALESSANDRA MONTALBANO, PAOLA BARRAJA.

*Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biologiche Chimiche e Farmaceutiche, Università di Palermo, Via Archirafi 32, 90123, Palermo
e-mail marilia.barreca@unipa.it*

Il nucleo [1,2]ossazolico è uno *scaffold* ricorrente in farmaci dotati di attività antitumorale. Tra questi, i derivati diarilissosazolici hanno mostrato una potente attività inibitoria della crescita nei confronti di linee cellulari tumorali umane, inducendo blocco del ciclo cellulare in fase G2/M. In particolare, analoghi [1,2]ossazolici della Combrestatina A-4 (CA4) si sono rivelati più efficaci della stessa CA4 nell'inibire la polimerizzazione della tubulina.¹ Derivati [1,2]ossazolo[5,4-e]isoindolici si sono dimostrati in grado di inibire la crescita cellulare *in vitro*, in modelli sperimentali di mesotelioma peritoneale maligno diffuso (DMPM), determinando blocco del ciclo cellulare in fase G2/M, mediante inibizione della polimerizzazione della tubulina; inoltre, alcuni derivati hanno mostrato una significativa attività antitumorale *in vivo* in modelli xenograft di DMPM a dosi ben tollerate.²

Individuati i *lead compound* della serie, al fine di ottenere composti con migliori *drug-like properties*, si è pensato di apportare modifiche strutturali al *core* triciclico al fine di migliorarne il profilo farmacocinetico. In particolare si è pensato: all'introduzione sull'azoto pirrolico di catene amino-etiliche o propiliche, recanti gruppi polarizzabili come gruppi morfolinici, pirrolidinici, piperidinici e dietilaminici; alla sintesi di derivati con un gruppo etossicarbonilico, altamente biocompatibile per i sistemi biologici, in posizione 6 del sistema triciclico; alla sintesi di derivati in cui la posizione 3 del sistema triciclico presenti un gruppo etossicarbonilico, facilmente convertibile in funzioni alcoliche o acide, fornendo un punto di attacco di catene aminiche, fondamentali per un ottimale profilo farmacocinetico. I risultati verranno discussi.



Bibliografia

¹ Kaffy, J.; Pontikis, R.; Carrez, D.; Croisy, A.; Monneret, C.; Florent, J.C., *Bioorg. Med. Chem.*, **2006**, 14, 4067.

² Spanò, V.; Pennati, M.; Parrino, B.; Carbone, A.; Montalbano, A.; Cilibrasi, V.; Lopergolo, A.; Cominetti, D.; Diana, P.; Cirrincione, G.; Barraja, P.; Zaffaroni N., *J. Med. Chem.*, **2016**, 59, 7223; Spanò, V.; Pennati, M.; Parrino, B.; Carbone, A.; Montalbano, A.; Lopergolo, A.; Zuco, V.; Cominetti, D.; Diana, P.; Cirrincione, G.; Zaffaroni, N.; Barraja, P., *Eur. J. Med. Chem.*, **2016**, 124, 840.

Synthesis of novel 1,2,4-oxadiazole topsentin analogs with antitumor activity

BARBARA PARRINO^A, DANIELA CARBONE^{A,B}, STELLA CASCIOFERRO^A, GODEFRIDUS J. PETERS^B, GIROLAMO CIRRINCIONE^A, ELISA GIOVANNETTI^B, PATRIZIA DIANA^A

^aDipartimento STEBICEF, Università degli Studi di Palermo, Via Archirafi 32, 90100 Palermo, Italy

^bDepartment of Medical Oncology, VU University Medical Center, Cancer Center Amsterdam, De Boelelaan 1117, 1081HV Amsterdam, The Netherlands
e-mail daniela.carbone@unipa.it

Marine environment is considered an unfailing source of compounds useful as a lead for the synthesis of new molecules of pharmaceutical interest, including some of the most potent antineoplastic agents yet discovered. Topsentins are relevant examples of marine alkaloids, isolated from the sponge *Spongosorites sp.*, with antitumor activity.^{1,2} In this study we conveniently synthesized a new series of topsentin analogs with the aim to target pancreatic cancer.

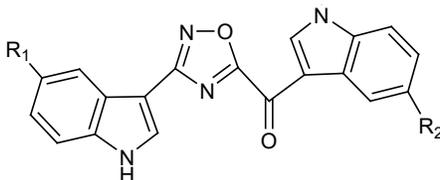


Figure 1. Structure of the new series of topsentin analogs

The inhibitory nature of new oxadiazole analogs (Fig.1) was examined in SUIT-2, CAPAN-1 and PANC-1 pancreatic cancer cell lines. All tested compounds showed promising antiproliferative activity at micromolar concentrations, against all the three pancreatic cancer cell lines, as confirmed by the range of IC_{50} values, from 0.4 to 7.14 mM. Cells exposed to oxadiazole compounds for 24 hours showed an increase of G2/M phase highlighting an additional induction of apoptotic cell death. Of note, the over-expression of *MMP-9* and *SNAIL2* genes suggests the induction of feedback mechanisms to counteract the anti-migration activity of these compounds, as assessed by the reduced cell migration of CAPAN-1 cells by 40-50%.

Our findings demonstrated the cytotoxic and anti-migration activities of new 1,2,4-oxadiazole topsentin analogs in several preclinical models of pancreatic cancer, supporting the use of this compounds as new anticancer agents.

Bibliografia

¹Tsujii, S., Rinehart, K. L., Gunasekera, S. P., Kashman, Y., Cross, S. S., Lui, M. S., Pomponi, S. A., Diaz, M. C. *Journal of Organic Chemistry*. **1988**, 53, 5446–5453.

²Bao, B., Sun, Q., Yao, X., Hong, J., Lee, C., Sim, C. J., Im, K. S., Jung J. H. *Journal of Natural Products*. **2005**, 68, 711–715.

Computational studies on antiviral targets: drug resistance mechanism and rational drug design

ISABELLA ROMEO, ANNA ARTESE, CARMINE TALARICO, GIOSUÈ COSTA, FRANCESCO ORTUSO, FRANCESCA ALESSANDRA AMBROSIO, STEFANO ALCARO.

*Dipartimento di Scienze della Salute, Università degli Studi Magna Graecia di Catanzaro, Viale Europa, 88100, Catanzaro
e-mail isabella.romeo@unicz.it*

Today different combinations of three or more antiretroviral drugs with long-lasting effectiveness are available. Unfortunately, in the case of HIV, the achievement of highly active antiretroviral therapy (HAART) is compromised by drug resistance caused by mutations, that alter inhibitors binding affinity, thus favoring HIV viral replication capacity. Anyway, the development of the HAART and its limitations could be useful in the discovery of new strategies for HIV-1 and to ameliorate the treatment strategies for other viral infections, such as HCV. At this purpose, the aim of the present work has been focused on the investigation of the impact of HCV and HIV mutational patterns on the stability and the drug-binding affinity of the known inhibitors against the key antiviral enzymes, as RT and IN for HIV, NS5A and NS5B for HCV, by using computational approaches.

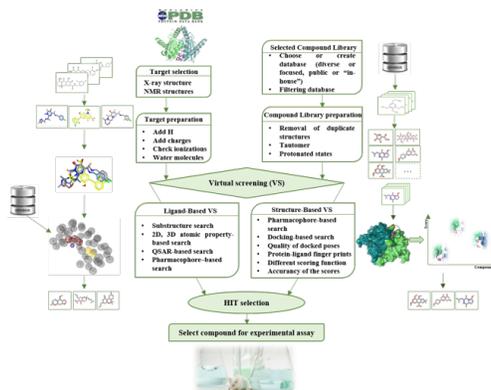


Figura 1: workflow of structure and ligand based virtual screening.

In detail, as concerns HIV-1 RT, docking simulations were performed in order to analyze the resistance profile to NRTIs and NNRTIs in presence of A98S and M184L/T mutations, respectively.[1] By using induced fit docking and molecular dynamics simulations, the behavior of DTG on the pre-inte-

gration complex when integrase carried N155H mutation was highlighted, resulting in a decreased stability also in co-presence of other mutations.[2] As concerns HCV, the impact of non-synonymous substitutions on HCV1b NS5B isolates from DAAs-naive patients' cohort was investigated, in order to evaluate the apo-polymerase stability and the binding affinity of known inhibitors, such as dasabuvir and setrobuvir.[3] Regarding NS5A protein, to investigate OMV drug-resistance profile, we studied the acquired resistance-associated substitutions plus polymorphism on NS5A phosphoprotein by computational studies.[4] Furthermore, another part of this project has been related to the identification of a new series of lead compounds towards HIV-1 RT (Figure 1), in order to exceed the limits due to the high cytotoxicity and the emergence of drug-resistance. In particular, an indoline pyrrolidine, an indonyl piperazine and an indolyl indolinone derivatives were identified as novel non-nucleoside RT inhibitors in the low micromolar range by a combined shape- and structure-based virtual screening approach.

Bibliografia

¹ Alteri, C.; Surdo, M.; Di Maio, V.C.; Di Santo, F.; Costa, G.; Parrotta, L.; Romeo, I.; Gori, C.; Santoro, M.M.; Fedele, V.; Carta, S.; Continenza, F.; Pinnetti, C.; Bellagamba, R.; Liuzzi, G.; Orchi, N.; Latini, A.; Bertoli, A.; Girardi, E.; Alcaro, S.; Giuliani, M.; Petrosillo, N.; Andreoni, M.; Antinori, A.; D'Arminio Monforte, A.; Ceccherini-Silberstein, F.; Artese, A.; Perno, C.F.; Svicher, V., *Journal of Global Antimicrobial Resistance*, **2016**, *7*, 1-7.

² Malet, I.; Ambrosio, F.A.; Subra, F.; Herrmann, B.; Leh, H.; Bouger, M.; Artese, A.; Katlama, C.; Talarico, C.; Romeo, I.; Alcaro, S.; Costa, G.; Deprez, E.; Calvez, V.; Marcelin, A.; Delelis, O., *Journal of Antimicrobial Chemotherapy*, **2018**, *73*, 1158-1166.

³ Romeo, I.; Marascio, N.; Pavia, G.; Talarico, C.; Costa, G.; Alcaro, S.; Artese, A.; Torti, C.; Liberto, M.C.; Focà, A. *ChemistrySelect*, **2018**, *3*, 6009-6017.

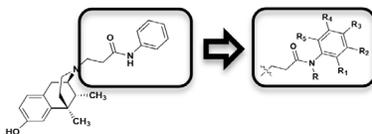
⁴ Marascio, N.; Pavia, G.; Romeo, I.; Talarico, C.; Di Salvo S.; Reale, M.; Marano, V.; Barreca, G.S.; Fabiani, F.; Perrotti, N.; De Siena, M.; Giancotti, F.; Gravina, T.; Alcaro, S.; Artese, A.; Torti, C.; Liberto, M.C.; Focà, A., *Journal of Medical Virology*, **2018**, 1-7.

Influenza del *N*-sostituente della (–)-*cis*-*N*-Normetazocina nella modulazione del profilo funzionale al MOR, DOR e KOR: da agonista ad antagonista attraverso ligandi misti agonisti/antagonisti

RITA TURNATURI,^A CARMELA PARENTI,^A ZAFIROULA GEORGOUSI,^B GIROLAMO CALÒ,^C EMANUELE AMATA,^A AGOSTINO MARRAZZO,^A AND LORELLA PASQUINUCCI^A

^a Department of Drug Sciences, University of Catania; ^bLaboratory of Cellular Signaling and Molecular Pharmacology NCSR “Demokritos” Athens, Greece; ^d Department of Medical Sciences, University of Ferrara.
e-mail rita.turnaturi@unict.it

La (–)-*cis*-*N*-Normetazocina è uno *scaffold* rigido che mima la tiramina dei peptidi oppioidi endogeni e l'introduzione di differenti *N*-sostituenti influenza affinità ed efficacia dei rispettivi ligandi *versus* MOR, DOR and KOR¹. Recentemente è stato identificato il *lead compound* LP1, ligando multitarget MOR/DOR, recante all'azoto basico della (–)-*cis*-*N*-Normetazocina un gruppo fenilpropanammidico. Derivati di LP1 con differenti *N*-sostituenti sono stati sintetizzati e caratterizzati farmacologicamente.



E' stata valutata l'influenza di una seconda carica positiva² e dell'accorciamento dello *spacer* del *N*-sostituente² oltre che l'effetto dell'introduzione di gruppi elettron-attrattori e -donatori nella posizione para dell'anello fenilico di LP1 e la sua sostituzione con anelli a maggiore ingombro sterico³. Ulteriori SAR sono state ottenute attraverso la sintesi di LP1-derivati con il fenile variamente sostituito con gruppi alchilici e delle rispettive ammidi terziarie ottenute attraverso l'introduzione di un sostituente benzilico. Da questi studi SAR è stato corroborato il ruolo critico del sostituente all'azoto basico della (–)-*cis*-*N*-Normetazocina che rappresenta un *template* per l'ottenimento di composti con uno specifico profilo funzionale nei riguardi dei recettori oppioidi, da agonista ad antagonista passando attraverso i ligandi *multitarget*.

References

- ¹ Turnaturi, R.; Marrazzo, A.; Parenti, C.; Pasquinucci, L. *Eur. J. Med. Chem.* **2018**, *148*, 410–422.
- ² Turnaturi, R.; Parenti, C.; Prezzavento, O.; Marrazzo, A.; Pallaki, P.; Georgoussi, Z.; Amata, E.; Pasquinucci, L. *Molecules* **2018**, *23*, E677
- ³ Pasquinucci, L.; Parenti, C.; Amata, E.; Georgoussi, Z.; Pallaki, P.; Camarda, V.; Calò, G.; Arena, E.; Montenegro, L.; Turnaturi, R. *Pharmaceuticals* **2018**, *11*, E40.

Engineering of polylactic acids for biomedical applications

SERENA M. TORCASIO,^{A,B} ANNA PIPERNO,^A PLACIDO G. MINEO,^C OLIVIER COULEMBIER,^B ANGELA SCALA^A.

^a*Department of Chemical, Biological, Pharmaceutical and Environmental Sciences, University of Messina, V.le F. Stagno d'Alcontres 31, 98166, Messina*

^b*Center of Innovation and Research in Materials and Polymers (CIRMAP), Laboratory of Polymeric and Composite Materials, University of Mons, Place du Parc 23, 7000 Mons, Belgium*

^c*Department of Chemical Sciences, University of Catania, V.le A.Doria, 95125, Catania*

e-mail storcasio@unime.it

In the continually expanding library of natural and synthetic polymers available for biomedical applications, polylactic acid (PLA) has emerged as one of the more promising biocompatible materials due to its highly controllable chemical composition and physical properties. In addition to the biocompatibility, the tuning of physical and biological properties of PLA by chemical functionalization with hydrophilic polymers, targeting agents and fluorescent probes is an integral part of polymer design for biomedical/pharmaceutical applications.¹ Here, we report two different synthetic strategies for the grafting of acetylene groups on PLA backbone. Alkyne-grafted PLA derivatives are useful building blocks for access to a variety of functionalized polymers by Cu(I)-catalyzed cycloaddition reaction (CuAAC) with azides derivatives. The reactions of *clickable* PLA derivatives with azide-functionalized compounds, such as polyethylene glycol, azide-fluor 545, folic acid and integrin-targeting RGD peptide, have been investigated.

Bibliografia

¹ Scala, A.; Piperno, A.; Torcasio, S.M.; Nicosia, A.; Mineo, P.G.; Grassi, G. "Clickable" polylactic acids obtained by solvent free intra-chain amidation. *Eur. Polymer J*, **2018**, 109, 341-346.

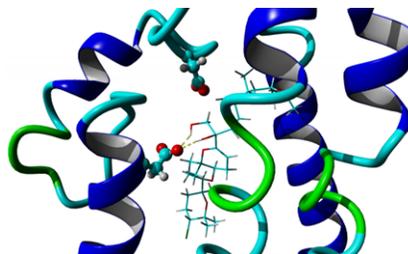
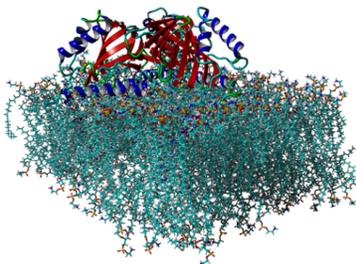
Acknowledgements: Progetto Dottorati FSE XXXII ciclo Unime CIP 2014.IT.05. SFOP.014/3/10.5/9.2.02/0006 - CUP G47E16000030009

La modellistica molecolare applicata ai recettori Sigma-1 e Sigma-2: un excursus

GIUSEPPE FLORESTA,^A DAVIDE GENTILE,^A MARIA DICHIARA,^A EMANUELE AMATA,^A ANTONIO RESCIFINA,^A AGOSTINO MARRAZZO^A

^a Dipartimento di Scienze del Farmaco, Università di Catania, Viale A. Doria 6, 95125, Catania
e-mail giuseppe.floresta@unict.it

I recettori sigma sono una classe di proteine ritenute, in passato come appartenenti ai recettori oppioidi; a tutt'oggi sono però considerati una classe separata di recettori.¹ La funzione di questi recettori è poco conosciuta, ma agonisti ed antagonisti dei recettori sigma-1 e sigma-2 sono in corso di valutazione per diverse applicazioni in campo terapeutico che vanno dal trattamento di patologie psichiatriche alla diagnosi e trattamento di tumori. Nel tentativo di individuare nuovi composti potenti e selettivi nei confronti di queste proteine, il nostro gruppo di ricerca ha recentemente applicato diversi metodi di modellistica molecolare che hanno portato ad una scoperta razionale di nuovi potenziali ligandi. Dalle relazioni quantitative struttura-attività ai calcoli di *docking* e simulazioni di dinamica molecolare, i diversi metodi possono essere positivamente applicati per il *design* razionale di nuovi *scaffolds* promettenti.²



Bibliografia

¹ Hayashi, T.; Su, T.P., *Curr. Neuropharmacol.*, **2005**, 3, 267.

² Rescifina, A.; Floresta, G.; Marrazzo, A.; Parenti, C.; Prezzavento, O.; Nastasi, G.; Dichiarà, M.; Amata, E., *Eur. J. Pharm. Sci.*, **2017**, 106, 94. Floresta, G.; Rescifina, A.; Marrazzo, A.; Dichiarà, M.; Pistarà, V.; Pittalà, V.; Prezzavento, O.; Amata, E., *Eur. J. Med. Chem.*, **2017**, 139, 884. Floresta, G.; Amata, E.; Barbaraci, C.; Gentile, D.; Turnaturi, R.; Marrazzo, A.; Rescifina, A., *Mar. Drugs*, **2018**, 16, 384. Floresta, G.; Dichiarà, M.; Gentile, D.; Prezzavento, O.; Marrazzo, A.; Rescifina, A.; Amata, E., *Int. J. Mol. Sci.*, **2019**, 20, 488.

Studio di speciazione di un legante 3-idrossi-4-piridinico in presenza di un catione metallico di interesse biologico

ANNA IRTO,^a PAOLA CARDIANO,^a KARAM CHAND,^b ROSALIA MARIA CIGALA,^a FRANCESCO CREA,^a CONCETTA DE STEFANO,^a SILVIO SAMMARTANO,^a MARIA AMÉLIA SANTOS^b

^a*Dipartimento di Scienze Chimiche, Biologiche, Farmaceutiche e Ambientali, Università di Messina, Viale F. Stagno d'Alcontres, 31 – 98166 Messina, Italia;*

^b*Centro de Química Estrutural, Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa, Av. Rovisco Pais 1, 1049-001 Lisboa, Portogallo.
e-mail airto@unime.it*

Questo contributo è il risultato di uno studio di speciazione di un legante 3-idrossi-4-piridinico in soluzione acquosa e in presenza di un catione metallico di interesse biologico in diverse condizioni sperimentali. I 3-idrossi-4-piridinoni sono prodotti di sintesi, derivati del deferiprone, potenzialmente utilizzabili per applicazioni nel campo della terapia chelante e per la detossificazione del corpo umano da cationi metallici *hard* (es. Al^{3+} , Fe^{3+}). Essi presentano un gruppo chetonico e uno idrossilico in posizione *orto*, che conferiscono loro una significativa capacità complessante nei confronti di M^{2+} e M^{3+} .¹ La sintesi del legante, *N*-extrafunzionalizzato con gruppi alchil-(ammino-carbossilici), è stata già oggetto di pubblicazione.² Le sue proprietà acido-base e la capacità complessante nei confronti dello Zn^{2+} sono state investigate mediante varie tecniche analitiche (potenziometria, spettrofotometria, spettroscopia ^1H NMR) in diverse condizioni di forza ionica e temperatura. La dipendenza dei parametri termodinamici di protonazione e di formazione dei complessi metallo-legante dalla forza ionica e dalla temperatura è stata studiata rispettivamente mediante le equazioni di Debye-Hückel estesa e di Van't Hoff. Infine la capacità sequestrante del legante, nei confronti dello Zn^{2+} , è stata investigata mediante il calcolo del parametro empirico $\text{pL}_{0.5}$, che rappresenta la concentrazione totale di legante necessaria a sequestrare il 50% del catione metallico presente in tracce, al variare delle condizioni sperimentali.³

Bibliografia

¹Chaves, S.; Piemontese, L.; Hiremathad, A.; Santos, M.A., *Curr. Med. Chem.* **2018**, *25*, 97-112.

²Irto, A.; Cardiano, P.; Chand, K.; Cigala, R.M.; Crea, F.; De Stefano, C.; Gano, L.; Sammartano, S.; Santos, M.A., *J. Inorg. Biochem.*, **2018**, *186*, 116-129.

³Crea, F.; De Stefano, C.; Foti, C.; Milea, D.; Sammartano, S.; *Curr. Med. Chem.* **2014**, *21*, 3819-3836.

Un modello realistico per visualizzazioni in didattica

ANTONELLA DI VINCENZO,^A MICHELE A. FLORIANO,^A

^a *Dipt. STEBICEF, Università di Palermo, Viale delle Scienze Ed. 17, 90123, Palermo*

e-mail antonella.divincenzo@unipa.it

Nella didattica chimica le visualizzazioni di fenomeni a livello atomico/molecolare sono un ausilio indispensabile nella razionalizzazione di fenomeni macroscopici utili a prevenire possibili misconcetti. Esistono infatti numerosi esempi di animazioni molecolari di fenomeni e processi di interesse chimico ma, quasi sempre, il comportamento dinamico non è basato su leggi fisiche realistiche. Attualmente, comunque gli strumenti di calcolo comunemente accessibili e la disponibilità di pacchetti software efficienti per simulazioni molecolari online hanno reso praticabile l'uso di modelli realistici anche a scopo didattico.

In questo lavoro è stato messo a punto un modello 2D per la simulazione del fenomeno di nucleazione e crescita di nanoparticelle basato sul metodo della Dinamica Molecolare (MD) che utilizza l'ambiente generale di simulazione disponibile su una piattaforma ad libero accesso.¹ In particolare, il modello consente di illustrare che, durante il processo di crescita di nanoparticelle, il rapporto superficie/volume diminuisce e ciò giustifica l'elevata attività catalitica delle nanoparticelle rispetto al materiale bulk.

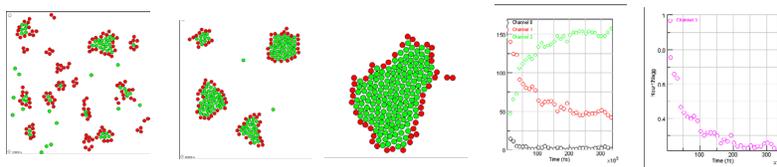


Figura 1. Processo di crescita di nanoparticelle. Sono riportati rispettivamente il numero di particelle libere (nero), superficiali (rosso) e aggregate (verde) ed il rapporto fra le ultime due quantità (fucsia).

Durante la simulazione vengono visualizzate immagini simili a quelle di Figura 1 che riporta un esempio a $T=300\text{K}$ per 200 particelle con diametro $\sigma=1.4\text{\AA}$, massa $=40\text{g/mol}$, interagenti mediante un potenziale di Lennard-Jones con $\epsilon=0.1\text{eV}$. Si può notare che il rapporto superficie/volume diminuisce rapidamente per raggiungere un valore costante quando si è formato un aggregato unico. È possibile modificare tutti i parametri della simulazione in modo da studiarne l'effetto.

Bibliografia

¹ <http://mw.concord.org/modeler/>

Cucurbit[7]urile: sintesi assistita da stampi molecolari ed applicazioni nelle reazioni di cicloaddizione 1,3-dipolare

VINCENZO PATAMIA,^A DAVIDE GENTILE,^A GIUSEPPE FLORESTA,^A ANTONIO RESCIFINA^A

^a Dipartimento di Scienze del Farmaco, Università di Catania, Viale A.

Doria 6, 95125, Catania

e-mail patamia.vincenzo@studium.unict.it

Al giorno d'oggi sono diversi i sistemi supramolecolari che vengono studiati per catalizzare le reazioni organiche in acqua, quali i cucurbiturili (CBn) e le ciclodestrine.¹ A fronte delle basse rese e della difficoltà di separazione del cucurbit[7]urile (CB7), abbiamo sviluppato un nuovo metodo, utilizzando stampi molecolari, a struttura imidazolica ed adamantanica, che hanno permesso di aumentare la resa rispetto alle classiche sintesi sinora riportate.² Al contempo, la conversione dello stampo in liquido magnetico, ha facilitato la separazione del CB7.

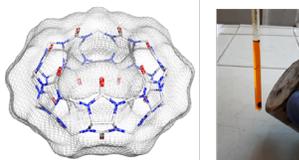


Figura 1

Successivamente, il CB7 è stato utilizzato, come reattore supramolecolare, per la sintesi stereocontrollata di isossazolidine sostituite sfruttando la reazione di cicloaddizione 1,3-dipolare tra nitroni e dipolarofili a struttura stirenica e cinnamica. La reazione è stata condotta in condizioni "GREEN" usando acqua e microonde.

Il meccanismo di reazione e d'inclusione, sia dei reagenti sia dei prodotti nella cavità idrofobica del CB7, ed il controllo stereochimico della reazione sono stati studiati e razionalizzati mediante esperimenti di spettroscopia NMR e calcoli di modellistica molecolare.

Bibliografia

¹ De Rosa, M.; La Manna, P.; Talotta, C.; Soriente, A.; Gaeta, C.; Neri, P, *Frontiers in Chemistry*, **2018**, 6, 84.

² Day, A.; Arnold, A.P.; Blanch, R.J.; Snushall, B., *J. Org. Chem.*, **2001**, 66, 8094.

Supramolecular nanoassemblies based on hyaluronic acid and polymeric cyclodextrins as therapeutic platforms

ANNALaura CORDARO,^{A,B} ROBERTO ZAGAMI^B, ANGELA SCALA,^A ANTONINO MAZZAGLIA^B AND ANNA PIPERNO^A

^aDepartment of Chemical, Biological, Pharmaceutical and Environmental Sciences, University of Messina, V.le F. Stagno d'Alcontres 31, 98166, Messina

^bCNR-ISMN c/o Department of Chemical, Biological, Pharmaceutical and Environmental Sciences of the University of Messina, V.le F. Stagno d'Alcontres 31, 98166, Messina;
e-mail acordaro@unime.it

The development of functional supramolecular polymers, that readily self-assemble in aqueous media into structurally stable nanoconstructs with high drug loading capacity and controlled drug release ability under different environmental conditions, has recently attracted considerable attention as an efficient strategy to improve the efficiency of current drug delivery systems.¹ Nanoscale polymer vehicles based on Hyaluronic Acid (HA) and poly-Cyclodextrin (CD) are very promising transport systems for delivering chemotherapeutic and biological drugs due to their aqueous solubility, low toxicity or immunity and supramolecular self-assembly ability after chemical modification. Here we describe the supramolecular nanoassemblies obtained by HA functionalized with β -CD² and by cationic-cyclodextrin polymer. Their drug binding abilities have been investigated by complementary spectroscopic techniques including UV-Vis, ζ -potential and DLS, using acyclovir and diclofenac as model drugs.

References

- 1) Dong, R.; Zhou Y.; Huang, X.; Zhu, X.; Lu, Y.; Shen, J. Functional supramolecular polymers for biomedical applications, *Adv. Mater.*, **2015**, 27, 498–526.
- 2) Piperno, A.; Zagami, R.; Cordaro, A.; Pennisi, R.; Musarra-Pizzo, M.; Scala, A.; Sciortino, M.T.; Mazzaglia, A. Exploring the entrapment of antiviral agents in hyaluronic acid cyclodextrin conjugates, *J. Incl. Phenom.*, **2018**, doi 10.1007/s10847-018-0829-6.

Acknowledgements: Milo Malanga (CycloLab - Budapest, HU); MatISSE Project P.O. FSE 2014/2020, PON03PE_00216_1 Drug Delivery, Institute Project: CNR-ISMN - Materials and Dispositives for Health and LifeQuality

Sintesi e studio fotofisico di sistemi Eu@POSS: controllo dell'emissione attraverso isomeria *cis-trans*.

VALERIO CINA,^{A,B} ESTHER CARBONELL,^{B*} LUCA FUSARO,^B MICHELANGELO GRUTTADAURIA,^A FRANCESCO GIACALONE,^A CARMELA APRILE^{B*}

^a Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biologiche, Chimiche e Farmaceutiche, Università di Palermo, Viale delle Scienze Ed. 17, Palermo, 90128, Italia

^b Unità di Chimica dei Nanomateriali (CNano), Università di Namur (UNa-mur), Dipartimento di Chimica, Rue de Bruxelles 61, Namur, 5000, Belgio
e-mail valerio.cina@unipa.it

I Silsesquiosani Poliedrici Oligomerici (POSS), sono nanostrutture che posseggono caratteristiche sia organiche che inorganiche. I POSS sono formati da uno scheletro di atomi di silicio e ossigeno, che formano una struttura cubica a gabbia di notevole stabilità termica e rigidità.¹ Sfruttando la reattività degli atomi di Si ai vertici della struttura, è possibile funzionalizzare quest'ultima con opportune molecole organiche ottenendo quindi strutture con diverse proprietà chimiche.^{2,3} Queste, possono rappresentare ottimi mattoncini di partenza per lo sviluppo di strutture 3D. In questo lavoro, POSS funzionalizzati con gruppi terpiridinici (POSS mono- e octa-funzionalizzati chiamati M-POSS e O-POSS) sono stati ottenuti tramite reazione di accoppiamento di Heck.⁴ È stata studiata la formazione di strutture polimeriche supramolecolari tridimensionali in presenza Eu³⁺, scelto per le sue proprietà luminescenti. Il processo di *self-assembly* tra M-POSS/O-POSS e Eu³⁺ è stato seguito tramite ¹H-NMR e tramite spettroscopia di assorbimento e di emissione. Le strutture 3D formate per interazione tra O-POSS ed Eu³⁺ hanno mostrato interessanti proprietà fotofisiche. L'O-POSS mostra isomeria *trans-cis* reversibile anche in presenza di Eu³⁺ permettendo così di modulare l'emissione passando dal blu al rosso al verde. Inoltre è possibile ottenere film fotoluminescenti per deposizione dell'O-POSS, disciolto in opportuno solvente.

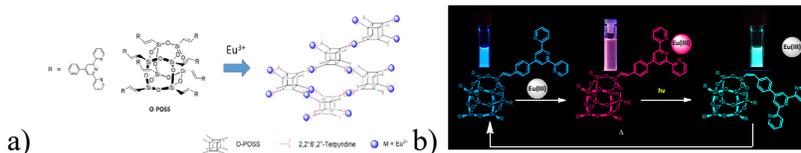


Fig 1. a) Processo di *self-assembly* dell'O-POSS assistito da interazione metallo legante tra le porzioni terpiridiniche e Eu³⁺. b) Isomerizzazione *trans-cis* di Eu@2O-POSS.

Bibliografia

C. Hartmann-Thompson (ed.s), Applications of Polyhedral Oligomeric Silsesquioxanes, Springer (2011).

a) Bivona L. A.; Fichera O.; Fusaro L.; Giacalone F.; Buaki-Sogo M.; Gruttadauria M.; Aprile C., *Catal. Sci. Technol.*, **2015**, *5*, 5000. b) Sellinger A; Laine RW., *Polym. Prepr. (Am. Chem. Soc. Div. Polym. Chem.)*, **1994**, 35,665.

Carbonell, E.; Bivona, L. A.; Fusaro, L.; Aprile C., *Inorg. Chem.*, **2017**, *56*, 6393.

Foto-reattori a membrana per la valorizzazione del CO₂

F. R. POMILLA^{A,B,C}, A. BRUNETTI^A, G. MARCÌ^C, E. I. GARCIA-LOPEZ^C, E. FONTANANOVA^A, L. PALMISANO^C, G. BARBIERI^A

^a Istituto Tecnologico delle Membrane (ITM-CNR), Consiglio Nazionale delle Ricerche, Università della Calabria, Cubo 17C, Via Pietro Bucci, 87036 Rende CS, Italia

^b Dipartimento di Ingegneria per l'Ambiente e il Territorio e Ingegneria Chimica, Università della Calabria, Via Pietro Bucci, 87036 Rende CS, Italia

^c "Schiavello-Grillone" Gruppo di Fotocatalisi. Dipartimento di Ingegneria, Università di Palermo, Viale delle Scienze, 90128 Palermo, Italia
e-mail francescarita.pomilla@unical.it

La foto-valorizzazione del CO₂ a molecole con più alto valore aggiunto è considerata una promettente strategia ecosostenibile al fine di contrastare il fenomeno del riscaldamento globale, fortemente influenzato dal contenuto di CO₂ nell'atmosfera.¹

In questo lavoro è stata studiata la foto-riduzione del CO₂ sotto irraggiamento con luce UV-Visibile, accoppiando per la prima volta la tecnologia del reattore continuo a membrana con l'utilizzo di catalizzatori a base di C₃N₄ puro o compositi C₃N₄-TiO₂ dispersi in una matrice polimerica di Nafion. Le prestazioni del reattore, in termini di produttività, selettività e carbonio convertito, sono state studiate in funzione del (i) tempo di contatto della miscela di alimentazione H₂O/CO₂ con il catalizzatore e (ii) del rapporto molare H₂O/CO₂. Per la membrana più attiva, in termini di CO₂ convertito, è stato valutato anche l'effetto della pressione. In generale, per entrambe le membrane studiate (C₃N₄-Nafion e C₃N₄-TiO₂-Nafion), i risultati hanno indicato una stretta dipendenza delle prestazioni del reattore con i parametri studiati. I migliori risultati, in termini di carbonio convertito e selettività ad alcoli, sono stati ottenuti con il più alto rapporto molare H₂O/CO₂ e ai più bassi valori di pressione e di tempo di contatto della miscela. Confrontando le prestazioni delle membrane studiate,² con i risultati riportati in letteratura,³ la membrana contenente il catalizzatore composito C₃N₄-TiO₂ ha mostrato la più alta velocità di conversione del CO₂ (61 mmol g⁻¹ h⁻¹).

Bibliografia

¹ A. D. Handoko, K. Li, J. Tang, *Current Opinion in Chemical Engineering* **2012**, 2, 200.

² F. R. Pomilla, A. Brunetti, G. Marci, E. I. Garcia-Lopez, E. Fontananova, L. Palmisano, G. Barbieri, *ACS Sustainable Chemistry and Engineering*, **2018**, 6, 8743.

³ M. Sellaro, M. Bellardita, A. Brunetti, E. Fontananova, L. Palmisano, E. Drioli, G. Barbieri, *RSC Advances*, **2016**, 6, 67418.

Archaeological metal treasures from sicilian seabed: the studies

FRANCESCO ARMETTA^a, EUGENIO CAPONETTI^b

^a*Scuola di Scienze e Tecnologie, Università di Camerino, Piazza dei Costanti, 62032 Camerino, Italy*

^b*Dipartimento Scienze e Tecnologie Biologiche, Chimiche e Farmaceutiche – STEBICEF, Università degli Studi di Palermo, Parco d'Orleans II, Viale delle Scienze pad. 17, I-90128, Palermo, Italy*
e-mail francesco.armetta.ch@gmail.com

Our research group is performing an extensive work in the field of cultural heritage. Between the other topics there is the study of archaeological metal objects. Several samples have been investigated such as roman bronzes from Pompei, the Tremiti plates and Alfedena Necropolis belts.

Due to the collaboration with the Soprintendeza del Mare della Regione Siciliana we studied several metal artwork coming from the Sicilian seabed.

The presentation will report two of the studies, which regard helmets and ingots [1-2].



Figure 1 Pictures of the helmets and of the orichalcum ingots.

For each of this case an appropriate set-up of analysis was developed in order to answer the archaeologist questions, and help to reconstruct the history of the objects. The used multianalytical approaches allows us to establish a network of national and international collaborations. Particularly, the results obtained with the investigation of the orichalcum ingots and helmets have had huge media success, with a strong impact on the dissemination of the importance of chemical-physical investigations to the study of archaeological objects.

Bibliografia

1 E. Caponetti, **F. Armetta***, L. Brusca, M. Delia Chillura, M. L. Saladino, S. Ridolfi, G. Chirco, M. Berrettoni, P. Conti, B. Nicolò, S. Tusa, *Microchemical Journal*, **2017**, 135.

2 E. Caponetti, **F. Armetta**, M. Delia Chillura, M. L. Saladino, S. Ridolfi, G. Chirco, M. Berrettoni, P. Conti, B. Nicolò, S. Tusa, *Mediterranean Archaeology and Archaeometry*, **2017**, 17 2.

Comunicazioni Poster

Sintesi di nuovi alchil-derivati di acidi triterpenici naturali: interazione con il Fattore Nucleare Kb e attivita' antitumorale verso l'epatocarcinoma cellulare umano

PIETRO AMICO¹, MAURIZIO BRUNO¹, GIANFRANCO FONTANA¹, MANUELA LABBOZZETTA¹, MONICA NOTARBARTOLO¹, PAOLA POMA¹, SERGIO ROSSELLI² e ALBERTO SPINELLA³

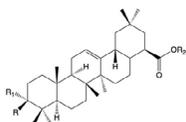
Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biologiche, Chimiche e Farmaceutiche (STEBICEF), Università degli Studi di Palermo, Viale delle Scienze, ed. 17, I-90128 Palermo, Italia; pietro.amico.ctf@gmail.com

Dipartimento di Scienze Agrarie, Alimentari e Forestali (SAAF), Università degli Studi di Palermo, Viale delle Scienze, ed. 4, I-90128 Palermo, Italia; sergio.rosselli@unipa.it

Centro Grandi Apparecchiature (CGA) – ATeN Center, Università degli Studi di Palermo, via F. Marini 14, 90128, Palermo, Italia; alberto.spinella@unipa.it

L'acido 3 β -hydroxy-olean-12-en-28-oico, noto con il nome comune di *Acido Oleanolico* (AO, R= -OH; R₁ = -H) e l'acido 3 β -hydroxy-olean-12-en-28-oico, noto come *Acido Ursolico* (AU, R= -OH; R₁ = -H) sono triterpeni pentaciclici ubiquitari che possiedono gli stessi gruppi funzionali: una frazione carbossilica in C-28, una funzione β -ossidrilica in C-3 e un doppio legame trisostituito tra C-12 e C-13; l'unica differenza strutturale risiede nella posizione del Me-30. Entrambi i composti hanno mostrato di possedere numerose proprietà biologiche, come, ad esempio: attività antinfiammatoria, antimicrobica ed antidiabetica [1]. È noto inoltre che AU è presente in numerosi vegetali noti per le loro proprietà antitumorali (come le mele ed i mirtilli), mentre un consumo regolare di alimenti ricchi in AO (olive, frutti di bosco) ha mostrato un certo effetto cancro-protettivo [2]. Gli acidi triterpenici ed i loro derivati sono caratterizzati da un meccanismo d'azione di elevata complessità biologica, che può implicare un numero elevato di target con cui questi triterpeni interagiscono. Tra le azioni biologiche si annoverano: induzione apoptotica, arresto del ciclo cellulare, autofagia, inibizione e riduzione del processo metastatico, blocco dell'angiogenesi. La nostra attenzione si è rivolta in particolare verso la capacità di queste molecole di inibire l'attivazione dell'NF-kB, un fattore nucleare di trascrizione che controlla molteplici funzioni cellulari, iperespresso durante lo sviluppo del carcinoma epatocellulare [2]. Nell'ambito di questo lavoro, sono state sintetizzate un gruppo di

molecole modificate al C-28 ed al C-3. Inoltre, sono stati ottenuti alcuni nuovi derivati per i quali è stata valutata la loro citotossicità verso linee cellulari di epatocarcinoma umano: Hep G2, Hep3B e HA22T/VGH. È stata quindi determinata l'attività di inibizione dei composti sintetizzati verso l'NF-kB.

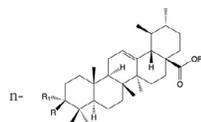


AO

R = -OH;

R₁ = -H, -Allyle, Me, -Et,
Butile;

R₂ = -Me;



AU

Bibliografia:

- ¹Meng, Y.Q.; Liu, D.; Cai, L.L.; Chen, H.; Cao, B.; Wang, Y.Z. The synthesis of ursolic acid derivatives with cytotoxic activity and the investigation of their preliminary mechanism of action. *Biorg. Med. Chem.* **2009**, *17*, 848-854, DOI: 10.1016/j.bmc.2008.11.036.
- ²Poma, P.; Notarbartolo, M., Labbozzetta, M.; Sanguedolce, R; Alaimo, A.; Carina, V.; Maurici, A.; Cusimano, A.; Cervello, M.; D'Alessandro N. Antitumor effects of the novel NF-kappaB inhibitor dehydroxymethyl-epoxyquinomicin on human hepatic cancer cells: analysis of synergy with cisplatin and of possible correlation with inhibition of pro-survival genes and IL-6 production. *Int. J. Oncol.* **2006**, *28*, 923-930, DOI: 10.3892/ijo.28.4.923.

The mystery of “tremiti plates wreck”: studies on the plates metal and corrosion phenomena

FRANCESCO ARMETTA(A), SEBASTIANO GIARRUSSO(B), ANTONELLA SCHERILLO(C), MARIO BERRETTONI(D), PAOLO CONTI(A), SILVIA ZAMPONI(A), ADELMO SORCI(E), EUGENIO CAPONETTI(F)

(a) *Scuola di Scienze e Tecnologie, Università di Camerino, Piazza dei Costanti, 62032 Camerino, Italy*

(b) *GEOLAB s.r.l., Via De Spuches, 90044 Carini (PA), Italy*

(c) *Rutherford Appleton Laboratory, ISIS Facility, Chilton OX11 0QX, UK*

(d) *Dipartimento di Chimica Industriale “Toso Montanari”, UoS campus di Rimini, Università di Bologna, Viale dei Mille 29, I-40196, Rimini, Italy*

(e) *Laboratorio del Mare Marlintremiti Via A. Vespucci, 71040 Isole Tremi (Fg), Italy*

(f) *Dipartimento Scienze e Tecnologie Biologiche, Chimiche e Farmaceutiche – STEBICEF, Università degli Studi di Palermo, Viale delle Scienze pad. 17, I-90128, Palermo, Italy*
e-mail francesco.armetta.ch@gmail.com

The Tremiti island seabed is full of archaeological sites, one of these is constituted by a cargo of hundreds of metal plates not well historically collocated.

In this work the study of some metal plates is reported, with the aim to provide new indication for the archaeologists.

The first preliminary information was obtained by using the X-Ray Fluorescence (XRF) spectroscopy. This technique revealed the composition of the sample, an alloy constituted by copper (80% w/w), lead (15% w/w) and low amounts of antimony, arsenic and silver. The amount of lead is very surprising if compared with others historical copper alloys.

On the basis of the above results, we decided to perform more deepen XRF analysis, Neutron Resonance Capture Analysis (NRCA) and Neutron Diffraction (ND) experiments. The XRF analysis was performed in several points of two plates. Neutron experiments were performed on INES line at the Rutherford Appleton Laboratories (ISIS). The NRCA elemental technique gave complementary information of XRF revealing the composition of the bulk. The neutron diffraction allowed to determine the phases composition mainly alfa copper and bronze phases and lead phase, revealing information about the production technology [1].

In order to get more insight about the elements distribution and the microstructure, a metallographic investigation was performed on a cross section that was analysed by Optical and Scanning Electron Microscopies (OM and SEM).

The combined use of these techniques give a synergic information for the metal description. Results of the investigation will be provided in the poster.

Bibliografia

I. Armetta F., Kockelmann W., Tusa S., Berrettoni M., Scherillo A., Fedrigo A., Brusca L., Guastella D., Saladino M. L., Chillura Martino D. F., Festa G., Aliotta F., Vasi C.S., Ponterio R.C., Caponetti E., “Neutron diffraction study on ancient orichalcum ingots.” 8th International Conference on Synchrotron Radiation and Neutrons in Art and Archaeology, Portsmouth, UK 3-7 September 2018.

Metodi chemiometrici per la sintesi razionale di nanowires di ZnO per l'elettronica su circuiti

GIUSEPPE ARRABITO,^a VITO ERRICO,^b ZEMIN ZHANG,^c WEIHUA HAN,^c CHRISTIAN FALCONI^b

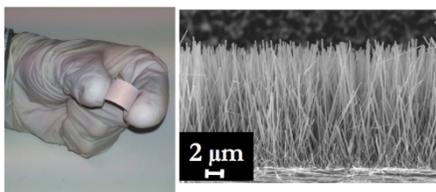
^a*Dipartimento di Fisica e Chimica, Università degli Studi di Palermo, V.le delle Scienze, 90128 Palermo, Italia.*

^b*School of Physical Science and Technology, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China*

^c*Department of Electronic Engineering, University of Rome Tor Vergata, Via del Politecnico I, 00133, Rome, Italy
e-mail giuseppedomenico.arrabito@unipa.it*

I nanowires di ZnO (ZnO NWs) rappresentano uno dei materiali 1D di maggiore interesse per lo sviluppo di sensori e/o trasduttori, date le loro ottime proprietà piezoelettriche e semiconduttive¹. Tuttavia, la sintesi chimica di ZnO NWs ad alto "aspect ratio" da soluzione acquosa a basse temperature (<90 °C), pur essendo utilizzabile per substrati flessibili, è spesso caratterizzata dalla bassa riproducibilità che ne rende difficoltosa l'integrazione in sistemi elettronici completi. Recentemente abbiamo sviluppato² un metodo per il controllo razionale della sintesi di nanowires di ZnO (Figura 1) su supporti conduttivi in rame per la realizzazione di nanotrasduttori.

Figura 1. Flessibilità del supporto con ZnO NWs ed immagine SEM in sezione.



In particolare, abbiamo progettato in modo sistematico, grazie a modelli numerici, un metodo di crescita per formare *in-situ* etilenediammina a partire da etanolammina al fine di formare complessi con ioni di zinco. La combinazione dell'etanolammina, per ottenere NWs sottili, e di ioni cloruro, per stabilizzare le facce (002), ci ha permesso di ottenere NWs ad alta densità (>8 μm^2) con record di lunghezza (>15 μm) e aspect ratio (> 200) per supporti flessibili².

Bibliografia

¹ Xu, S.; Wang, Z.L.; *Nano Res.*, **2011**, 4, 1013.

² Arrabito, G.; Errico V.; Zhang Z.; Han W.; Falconi C.; *Nano Energy*, **2018**, 46, 54.

How solution ionic strength affects the binding of nickel(II), copper(II) and zinc(II) Salphen-like complexes with double-helical DNA

GIAMPAOLO BARONE,^A CLAUDIO MIGLIORE,^A GIANLUCA FARINE,^A MATTEO RIZZO,^A RICCARDO BONSIGNORE^B

^a Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biologiche, Chimiche e Farmaceutiche, Università degli Studi di Palermo, Viale delle Scienze, Edificio 17, 90128 Palermo

^b School of Chemistry, Cardiff University, Main Building, Park Place, CF10 3AT Cardiff, UK
e-mail giampaolo.barone@unipa.it

The DNA-binding of Ni^{II}, Cu^{II} and Zn^{II} functionalized Salphen complexes (Figure 1) has been the subject of spectroscopic investigations, in buffered water solution at physiological pH,¹⁻³ and using, e.g., UV-visible absorption, circular and linear dichroism. Interestingly, the binding constant at low ionic strength, i.e. in 1 mM Tris-HCl, or in physiological ionic strength conditions, i.e. in 50 mM Tris-HCl and 100 mM KCl, where quantitatively different, of 1-2 orders in magnitude. In particular, the counterion screening of the electrostatic attraction between the negatively charged phosphate groups of DNA and of the positively charged metal complexes, reduces the DNA-binding by increasing the ionic strength conditions. In the present poster we highlight recent investigations on the subject.

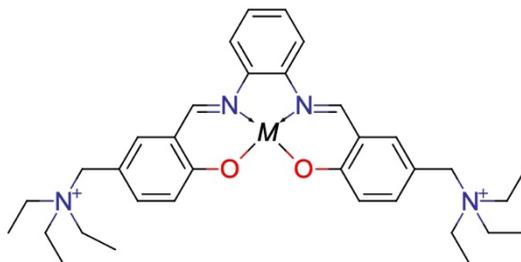


Figure 1. Structure of the Salphen-like metal complexes; M = Ni, Cu, Zn

Bibliography

¹ Silvestri, A.; Barone, G.; Ruasi, G.; Anselmo, D.; Riela, S.; Turco Liveri, V., *J. Inorg. Biochem.*, **2007**, *101*, 841

² Barone, G.; Gambino, N.; Ruggirello, A.; Silvestri, A.; Terenzi, A.; Turco Liveri, V., *J. Inorg. Biochem.*, **2009**, *103*, 731

³ Terenzi, A.; Ducani, C.; Male, L.; Barone, G.; Hannon, M.J., *Dalton Trans.*, **2013**, *2*, 11220

Complessi liquido ionico-cobalto: un'interazione termocromica

FLORIANA BILLECI,^A FRANCESCA D'ANNA,^A RENATO NOTO,^A H. Q. NIMAL GUNARATNE,^B NATALIA V. PLECHKOVA,^B KENNETH R. SEDDON.^B

^a Università degli Studi di Palermo, Dipartimento STEBICEF – Sezione di Chimica, Viale delle Scienze, Ed. 17, 90128, Palermo, Italia.

^b QUILL Research Centre – Queen's University di Belfast, Stranmillis Road, Belfast, BT9 5AG, Irlanda del Nord, Regno Unito.

e-mail floriana.billeci@unipa.it

Le ben note proprietà chimico-fisiche dei liquidi ionici (ILs), unite alla versatilità strutturale, sono alla base delle loro numerose e differenti applicazioni. In questo lavoro, si presenta un'interazione termocromica reversibile, sia in soluzione che in un film polimerico, tra un IL portante sul catione un residuo gluconammidico e il sale di cobalto $\text{Co}(\text{NTf}_2)_2$.¹ I gruppi ossidrilici sul catione e l'anione bromuro dell'IL coordinano il Co al variare della temperatura applicata. A temperatura ambiente il complesso OH-Co risulta ottaedrico (rosa) mentre, intorno ai 60 °C, la geometria diviene tetraedrica con lo ione bromuro che coordina il Co (blu). Lo studio VT UV-vis (Figura 1) ha permesso di identificare le bande relative ai complessi e il loro andamento con la temperatura, determinando anche la temperatura di *switch* delle geometrie. Incorporando metallo e legante in un polimero, è stato ottenuto un film polimerico avente le stesse proprietà della soluzione. Il range di temperatura del fenomeno termocromico studiato (20-90 °C) è tale da rendere il sistema applicabile in *device* termosensibili.²

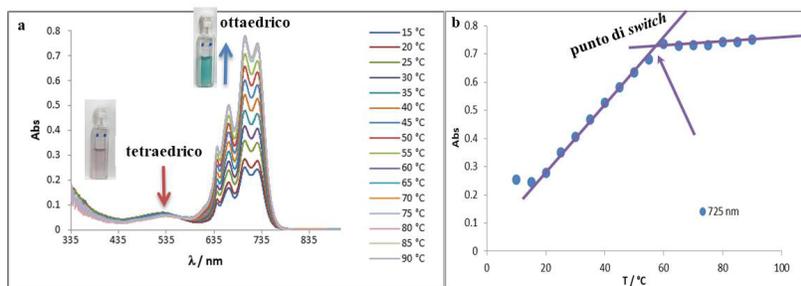


Figura 1 - a) Spettri di assorbimento; b) trend dell'assorbanza al variare della temperatura.

Bibliografia

¹ Osborne, S. J.; Wellens, S.; Ward, C.; Felton, S.; Bowman, R. M.; Binnemans, K.; Swadzba-Kwasny, M.; Gunaratne, H. Q. N.; Nockemann, P. *Dalton Trans.*, **2015**, 44, 11286.

² Zhang, K.; Zhang, M.; Feng, X.; Hempenius, M. A.; Vancso, G. J. *Advan Funct Mater* **2017**, 27, 1702784.

Materiali catalitici a base di nanoparticelle di palladio immobilizzate su nanoforme di carbonio

CARLA CALABRESE,^{A,B} VINCENZO CAMPISCIANO,^A LEONARDA F. LIOTTA,^C VALERIA LA PAROLA,^C ALBERTO SPINELLA,^D CARMELA APRILE,^B MICHELANGELO GRUTTADAURIA,^A FRANCESCO GIACALONE^B

^a Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biologiche Chimiche e Farmaceutiche, Università di Palermo, Viale delle Scienze Ed. 17, 90128, Palermo (Italy)

^b Département de Chimie, Université de Namur, Rue de Bruxelles, 5000, Namur (Belgium)

^c Istituto per lo Studio dei Materiali Nanostrutturati (ISMN-CNR), Via Ugo La Malfa 153, 90146, Palermo (Italy)

^d Centro Grandi Apparecchiature-ATeN Center, Università degli Studi di Palermo, Via F. Marini 14, 90128 Palermo, Italy.

e-mail (carla.calabrese@unipa.it)

Nanocorni e nanotubi di carbonio sono stati utilizzati per il design di nuovi supporti catalitici a base di sali di imidazolio. Tali ibridi sono stati preparati tramite polimerizzazione radicalica di un sale di bis-vinilimidazolio in presenza di nanocorni o di nanotubi di carbonio. Le indagini condotte tramite microscopia a trasmissione elettronica hanno evidenziato, per entrambe le nanostrutture selezionate, un carattere templante nello *step* di polimerizzazione. Tali materiali sono stati impiegati come supporti per l'immobilizzazione di nanoparticelle di palladio. Gli ibridi ottenuti sono stati impiegati come catalizzatori eterogenei nelle reazioni di Suzuki e di Heck risultando altamente attivi, riciclabili e versatili.¹

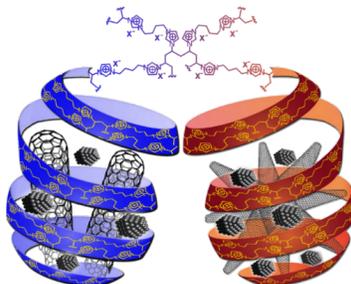


Figura 1. Ibridi a base di nanoparticelle di palladio supportate su nanoforme di carbonio.

Bibliografia

¹ Campisciano, V.; Calabrese, C.; Liotta, L. F.; La Parola, V.; Spinella, A.; Aprile C.; Gruttadauria, M.; Giacalone, F., *Appl. Organometal. Chem.*, **2019**, doi: 10.1002/aoc.4848.

Uno studio comparativo *in silico* sui possibili target di Ataluren e analoghi farmaci promotori di *readthrough* di codoni di stop prematuri

AMBRA CAMPOFELICE^a, GIULIA CULLETTA^a, MARCO TUTONE^a, IVANA PIBIRI^a, LAURA LENTINI^a, ANDREA PACE^a, ANNA MARIA ALMERICO^a

^a *Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biologiche, Chimiche e Farmaceutiche (STEBICEF) Università Degli Studi di Palermo, Via Archirafi 28 e Viale delle Scienze Ed.16-17, Palermo, Italy*
email ambra.campofelice@unipa.it

E' noto in letteratura che Ataluren (acido 5-(fluorofenil)-1,2,4-ossadiazolil-benzoico) sia in grado di sopprimere le mutazioni non senso favorendo il *readthrough* dei codoni di stop prematuri, anche se il suo meccanismo di azione non risulta ancora chiaro. La probabile interazione tra Ataluren e CTRF-mRNA è stata precedentemente studiata mediante dinamica molecolare. In questo studio¹, abbiamo esteso il modeling del probabile meccanismo di azione di Ataluren mediante approcci computazionali completamenti, quali Induced Fit Docking (IFD), Quantum Polarized Ligand Docking (QPLD), metodi MM-GBSA e mutagenesi computazionale.

Oltre a considerare il CTRF-mRNA, sono stati presi in considerazione altri target implicati nel processo di traduzione, quali la subunità 16S dell'rRNA batterico e la subunità 18S dell'rRNA eucariotico, che sono target comprovati di molti aminoglicosidi noti per la loro capacità di sopprimere l'attività di correzione svolta normalmente dal ribosoma; il fattore di rilascio eucariotico eRF1, per valutare la potenziale influenza di Ataluren sulla fine del processo di traduzione. Inoltre, è stato effettuato un confronto tra Ataluren, un suo nuovo promettente analogo NV2445 (acido 4-(5-(o-tolil)-1,3,4-ossadiazol-2-il)benzoico)² e una serie di antibiotici aminoglicosidici. I risultati hanno confermato che mRNA è il più probabile target per Ataluren e i suoi derivati. I calcoli di energia libera di legame effettuati in seguito alla mutagenesi computazionale, hanno mostrato che il legame tra Ataluren e il codone di stop prematuro è fortemente influenzato dalla presenza di nucleotidi ausiliari nell'intorno genico.

Bibliografia

¹ Tutone, M.; Pibiri, I.; Pace, A.; Almerico, A. M., *ACS Med. Chem. Lett.*, **2019**, in press

² Pibiri, I.; Lentini, L.; Melfi, R.; Tutone, M.; Baldassano, S.; Ricco Galluzzo, P.; Di Leonardo, A.; Pace, A., *Eur. J. Med. Chem.*, **2018**, 159, 126-142.

Hydrocarbons removal from wastewater by adsorption onto biochar from *posidonia oceanica*

SALVATORE CATALDO, FRANCESCO GIANNICI, ANTONINO MARTORANA, NICOLA MURATORE, ALBERTO PETTIGNANO, FEDERICA URSI.

Dipartimento di Fisica e Chimica, Università di Palermo, Viale delle Scienze Ed.17, 90128, Palermo
e-mail salvatore.cataldo@unipa.it

Environmental pollution by petroleum derivatives is a very current topic. In particular, low concentration of this kind of pollutants can seriously compromise the life of animals and plants of aquatic ecosystems [1]. For this reason, recent environmental legislation imposes severe restriction to oil-in-water content for overboard discharge with concentration limits from 15 to 5 ppm [2]. The shipping industry is trying to adapt to these directives by equipping ships with cleaning treatment devices in which there are several oil removal steps.

Usually, the last step of bilge water treatment is based on adsorption onto suitable adsorbent materials that must be able to remove the last and most dispersed oil fraction reducing its concentration within legal limits.

In this work, a biochar obtained from pyrolysis of *Posidonia oceanica*, a Mediterranean sea plant, has been tested as adsorbent material of a synthetic bilge water. The pristine biochar (BCP) was tested as it was and after two chemical activation treatments with sulfuric acid (BCA) and potassium hydroxide (BCB). The adsorbent materials have been characterized by using different techniques (TGA, SEM-EDAX, FT-IR, etc) and their adsorption capacity was studied by batch and column experiments. Oil concentration measurements were performed by using: HPLC-FLD and TOC techniques.

Bibliografia

¹ L. Yu, M. Han, F. He, A review of treating oily wastewater, Arab. J. Chem. 10 (2017) S1913–S1922. doi:10.1016/j.arabjc.2013.07.020.

² MEPC.107(49). Annex 13. Revised guidelines and specifications for pollution prevention equipment for machinery space bilges of ships resolution (2003).

Elettrodeposizione di Bitiofene Fulleropirrolidina per la realizzazione di sensori piezoresistivi

CLARA CHIAPPARA,^A GIUSEPPE ARRABITO,^A VINCENZO CAMPISCIANO,^B VITO ERRICO,^C GIOVANNI SAGGIO,^C MICHELANGELO GRUTTADAURIA,^B FRANCESCO GIACALONE,^B BRUNO PIGNATARO^A

^ADipartimento di Fisica e Chimica, Università degli Studi di Palermo, V.le delle Scienze, 90128 Palermo, Italia.

^BDipartimento di Scienze Biologiche, Chimiche e Farmaceutiche (STEBICEF), Università degli Studi di Palermo, V.le delle Scienze Ed. 17, Palermo, Italia.

^CDipartimento di Ingegneria Elettronica, Università di Roma "Tor Vergata", 00133 Roma, Italia.

e-mail chiapparaclara@gmail.com

Un nuovo sistema donatore-accettore bisaddotto bitiofene fulleropirrolidina (bis-C60Bi) è stato elettropolimerizzato su ITO/PET(ossido di Indio-Stagno)/PoliEtilene Tereftalato per cronoamperometria. E' stato applicato un potenziale anodico di 1.5V alla soluzione di monomero per un certo tempo fino all'ottenimento di un film sottile polimerico sul substrato. Caratterizzazioni XPS, UV-vis hanno confermato la presenza del polimero sull'elettrodo. Tramite metodologie da stampa a getto d'inchiostro, sono stati realizzati degli elettrodi di argento che permettono al fine di verificare le variazioni di resistenza elettrica del sistema film sottile polimerico + ITO al variare del piegamento per testare le proprietà piezoresistive, che possono essere di interesse per la fabbricazione di sensori indossabili con minima invasività¹.

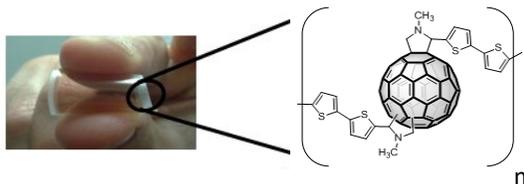


Figura 1. Nuovo polimero bitiofene fulleropirrolidina depositato su plastica.

In particolare, misure elettriche in statica effettuate sul polimero al variare del piegamento hanno mostrato una variazione di resistenza notevole, lineare anche a bassi angoli. Sono in corso misure in dinamica sul sensore a base di bis-C-60Bi per ottenere informazioni sulla ripetibilità/riproducibilità dei valori testati.

Bibliografia

1Jasoon, N.;Ho, My D.; Cheng, *W.J. Mater. Chem. C*, 2017,5, 5845.

Un approfondito studio termodinamico sull'interazione di As(III) con leganti di interesse biologico: glutatione e cisteina

DONATELLA CHILLÉ, CLAUDIA FOTI E OTTAVIA GIUFFRÉ.

Dipartimento di Scienze Chimiche, Biologiche, Farmaceutiche ed Ambientali. Università degli Studi di Messina, Viale Ferdinando Stagno D'Alcontres 31, 98166, Messina
e-mail dhille@unime.it

L'arsenico è un metalloide facilmente riscontrabile in tutti i comparti ambientali per cause di diversa natura. La sua ben nota tossicità è correlata alla forma chimica e allo stato di ossidazione in cui esso si presenta. Nel caso specifico, l'arsenico nella forma trivalente, As(III), desta particolare preoccupazione in quanto è in grado di interagire con molecole biologiche contenenti gruppi tiolici, inibendo importanti processi biochimici¹. Dal punto di vista termodinamico, tuttavia, pochi e non particolarmente articolati sono gli studi in merito. Pertanto, il presente lavoro si prefigge come scopo quello di investigare l'interazione di As(III) con leganti di particolare rilevanza biologica, quali glutatione e cisteina. Mediante l'uso di più tecniche analitiche, quali la potenziometria, la spettrofotometria e la calorimetria è stato possibile definire il modello di speciazione, così come i parametri termodinamici delle specie interessate. Al fine di valutare la dipendenza delle costanti di stabilità delle specie complesse dalla forza ionica, le misure potenziometriche sono state eseguite in un ampio intervallo di forza ionica ($0.15 < I/\text{mol L}^{-1} < 1$) e, sfruttando un'equazione tipo Debye-Hückel, è stato possibile calcolare la costante di stabilità a diluizione infinita ($\log \beta^0$) così come il parametro empirico C, entrambi essenziali per il calcolo delle costanti di formazione in condizioni di forza ionica diverse da quelle sperimentali. A completamento dello studio, è stata calcolata anche la capacità sequestrante dei due leganti nei confronti del metallo utilizzando un parametro empirico noto come $pL_{0.5}$. Esso rappresenta la concentrazione totale di legante richiesta per sequestrare il 50% di metallo presente in tracce².

Bibliografia

¹ Hughes, M.F.; *Toxicology Letters*, **2002**, 133, 1-16.

² Crea, F.; De Stefano, C.; Foti, C.; Milea D.; Sammartano, S.; *Curr. Med. Chem.*, **2014**, 21, 3819-3836.

The authors acknowledge FSE regional funds for PhD support to D.C.

Development of novel azole-based Heme Oxygenase-1 Inhibitors

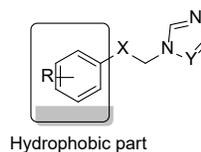
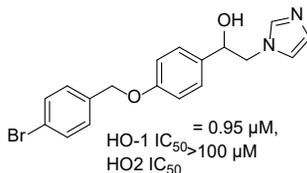
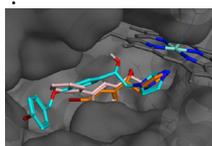
VALERIA CIAFFAGLIONE,^A ANTONINO N. FALLICA,^A CARMEN LEONARDI,^A
SEBASTIANO INTAGLIATA,^B MARIA DICHIARA,^A CARLA BARBARACI,^A GIUSEPPE
CAROTA,^A LOREDANA SALERNO.^A

^a Dipartimento di Scienze del Farmaco, Università di Catania, Viale A.
Doria 6, 95125, Catania

^b Department of Medicinal Chemistry, College of Pharmacy, University of
Florida, Gainesville, FL, USA.

e-mail valeciaffa@yahoo.it

Heme oxygenase (HO) is the family of enzymes responsible for the conversion of heme into its three metabolites: carbon monoxide, ferrous iron and biliverdin, rapidly reduced in bilirubin¹. Among the three known isoforms of HO, the first one (HO-1) is the most studied, mainly for its highly overexpression under stressful and pathological conditions. The discovery that the suppression of HO-1 may have therapeutic potential, especially in tumours, led to the rational design of HO-1 inhibitors². The general structure of the most active HO-1 developed inhibitors includes an azole nucleus (an imidazole ring is generally preferred), essential for the interaction with the enzyme, and an aryl portion, inter-linked by a central spacer. Recently, our research group developed new imidazole-based compounds endowed with high potency towards HO-1 and selectivity over HO-2 (Fig. 1A-B)³.



In this work, supported by both structure-activity relationship and molecular modeling studies, we report further modifications (Fig. 1C) of the hydrophobic moiety (aryl or aryloxy), the central spacer (ethanol, ethanone, alkylen chain), and azole ring (1,2,4 triazole instead of imidazole), using as lead compounds the most active and selective phenylethanol derivatives previously developed³, such as 1-[4-((4-bromobenzyl)oxy)phenyl]-2-(1*H*-imidazol-1-yl)ethan-1-ol (Fig. 1B). Obtained results will be presented at the meeting.

Bibliografia

¹ Abraham, N.G.; Kappas, A. *Pharmacological reviews*, **2008**, 60, 79-127.

² Pittalà, V.; Salerno, L.; Romeo, G.; Modica, M.N.; Siracusa, M.A. *Current Medicinal Chemistry*, **2013**, 20, 3711-3732.

³ Salerno, L.; Amata, E.; Romeo, G.; Marrazzo, A.; Prezzavento, O.; Floresta, G.; Sorrenti, V.; Barbagallo, I.; Rescifina, A.; Pittalà, V. *European journal of medicinal chemistry*, **2018**, 148, 54-62.

Proprietà acido-base e reattività dei polialcol

ROSALIA MARIA CIGALA,^A FRANCESCO CREA,^A CONCETTA DE STEFANO,^A
ANNA IRTO,^A SILVIO SAMMARTANO^A

^a *Dipartimento di Scienze Chimiche, Biologiche, Farmaceutiche e Ambientali, Università di Messina, Viale F. Stagno d'Alcontres 31, 98166, Messina e-mail rmcigala@unime.it*

I polialcol sono monomeri o polimeri con gruppo funzionale ossidrile. Essi rivestono grande importanza nelle scienze dell'alimentazione, in quanto essendo dei carboidrati idrogenati sono utilizzati come dolcificanti in sostituzione dello zucchero. Recentemente, l'interesse verso il loro consumo è aumentato, a causa del loro potenziale effetto benefico per la salute. I polialcol, infatti, sono non-cariogenici, hanno un basso valore energetico, un basso indice glicemico e insulino, vengono digeriti più lentamente, ed hanno proprietà osmotiche (idratazione del colon, con effetto lassativo e depurativo). I polioli contribuiscono a formare acidi grassi a catena corta favorevoli per la salute del colon¹, inoltre favoriscono la formazione degli organismi anaerobici saccarolitici e acidurici nel colon, i quali lo purificano dagli organismi endotossici in putrefazione e patologici, il che spiega la loro importanza e rilevanza clinica. In questo contributo è riportato lo studio delle proprietà acido-base e delle capacità complessanti di alcuni polialcol: eritritolo, maltolo, etilmaltolo e sorbitolo. Esempi dell'importanza di questi polialcol: l'eritritolo, da recenti studi, evidenzia attività antiradicalica, dimostrandosi un ottimo scavenger di radicali idrossilici, con proprietà protettive per le membrane cellulari²; il sorbitolo può essere utilizzato analiticamente come marker per la valutazione del flusso ematico epatico; il maltolo presenta interessanti attività antineoplastiche^{3,4}; l'etilmaltolo, ed in generale i 3-idrossi-4-pirani, è impiegato sia per il controllo dei livelli di metalli nel corpo che per la somministrazione orale a fini diagnostici o terapeutici⁵.

Bibliografia

- ¹ Livesey G., *Nutrition Research Reviews*, **2003**, 16, 163.
- ² Den Hartog G.J.M., Boots A.W., Adam-Perrot A., Brouns F., Verkooijen I.W.C.M., Weseler A.R., Haenen G.R.M.M., Bast A., *Nutrition*, **2010**, 26, 449.
- ³ Hironishi M., Kordek R., Yanagihara R., Garruto R.M., *Neurodegeneration*, **1996**, 5, 325.
- ⁴ Yasumoto E., Nakano K., Nakayachi T., Morshed S.R., Hashimoto K., Kikuchi H., Nishikawa H., Kawase M., Sakagami H., *Anticancer Res.*, **2004**, 24, 755.
- ⁵ Hider R.C., Hall A.D., *Prog Med Chem.*, **1991**, 28, 132.

Elementale, Watson! Alla scoperta della tavola periodica

MARIA COSTA,^A FEDERICA URSI,^A MAURO TRAPANI,^B.

^a *Dipartimento di Fisica e Chimica, Università di Palermo, Viale delle Scienze ed.17, 90124, Palermo*

^b *Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale, Università di Pisa, Via Giuseppe Moruzzi n°13, 56124, Pisa*
e-mail (mariacosta92@libero.it)

Gli autori presentano un laboratorio didattico rivolto a studenti del primo biennio di scuola secondaria di II grado, che permette di comprendere il comportamento periodico e le caratteristiche principali di alcuni gruppi di elementi.

Il laboratorio è articolato in differenti fasi. Viene inizialmente presentata una Tavola Periodica contenente solo l'idrogeno e i pesi atomici di tutti gli elementi fino alla seconda cifra decimale. Seguendo un percorso interattivo, a conclusione di ogni fase del laboratorio gli elementi verranno posizionati sulla Tavola periodica, che a poco a poco si completerà, anche se solo parzialmente. Nella prima fase viene fatta assaggiare una sostanza incognita (NaCl) evidenziando le differenze e le analogie che ci sono tra i composti degli elementi dello stesso gruppo (rispettivamente KCl e LiCl). La seconda fase prevede la visione dei colori di composti di elementi del primo e secondo gruppo della Tavola Periodica saggiati alla fiamma (nel caso in cui non ci sia la possibilità di procedere con i saggi, si può procedere con la visione di video degli stessi). Durante la terza fase vengono mostrate delle ampolle, all'apparenza vuote, contenenti i gas nobili che sono resi visibili mediante l'uso di una lampada di Tesla. Durante la quarta fase sono mostrati ossidi, cloruri e solfati di rame, argento e oro. Questi sono associati ai rispettivi metalli mediante semplici reazioni chimiche, sfruttando il colore delle soluzioni ottenute. L'ultima fase permette di collocare carbonio e silicio mediante reazioni con acido cloridrico, sfruttando l'effervescenza dei carbonati e la mancanza di essa nei silicati. Al termine del laboratorio viene mostrata e illustrata una Tavola Periodica completa.

Nel corso di questo percorso interattivo, vengono citati alcuni brani, attinenti alle attività proposte, tratte da "Il Sistema Periodico" di Primo Levi. L'idea del progetto, che nasce in occasione delle celebrazioni per i 150 anni della tavola periodica e del centenario della nascita di primo levi, può essere un utile strumento didattico per presentare il concetto di periodicità.

Analisi chimiche di campioni di pasta biofortificata

VITA DI STEFANO^A, ELVIRA COPPOLA^A, CARMELO BARCHETTA^A, ANTONELLA PAGLIARO^B, MARIA GRAZIA MELILLI^B

^A*Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biologiche Chimiche e Farmaceutiche (STEBICEF) Via Archirafi 32- 90123, Palermo.*

^B*Consiglio Nazionale delle Ricerche, Istituto per i Sistemi Agricoli e Forestali del Mediterraneo, (ISAFOM) U.O.S. Catania., Via Empedocle, 58, 95125 Catania.*

e-mail (vita.distefano@unipa.it)

La pasta è l'alimento di origine italiana più conosciuto nel mondo e utilizzato ampiamente, essendo una buona fonte di carboidrati a basso indice glicemico. La produzione della pasta "biofortificata" rappresenta una strategia semplice per aumentare l'apporto nella dieta di fibre, proteine, etc. Lo studio proposto vede l'analisi chimica di campioni di pasta biofortificata, ottenuta aggiungendo alla semola di grano duro il 40% di lenticchie di due diverse origini. In particolare per la preparazione della pasta biofortificata, è stato utilizzato un campione di lenticchie che abbiamo definito "commerciale" (cv Easton, origine Canada), insieme ad un campione di lenticchie prodotte a Ragusa (banca del germplasma del CNR ISAFOM di Catania). Le analisi chimiche effettuate sui campioni sono state mirate allo studio della composizione in acidi grassi e del contenuto aminoacidico attraverso GC-MS, insieme al contenuto in polifenoli totali attraverso il metodo di Folin-Ciocalteu.

Le analisi degli esteri metilici degli acidi grassi (FAMES) sui campioni di lenticchie "commerciali" e "Ragusa" ha messo in evidenza la presenza di una buona quantità di acidi grassi insaturi. In entrambi i campioni si riscontra l'acido linoleico (42%), seguito da oleico (29%), α -linolenico (10%), palmitico (15%) e stearico (3%). La farina di grano duro presenta un profilo in acidi grassi simile a quello delle lenticchie ma con un contenuto in acido linoleico inferiore. La preparazione dei campioni di pasta fortificata, e la successiva cottura di queste ha messo in evidenza una perdita di acidi grassi intorno al 45% dopo la cottura. Gli aminoacidi identificati attraverso GC-MS nei due campioni di lenticchie presenta un simile andamento. L'acido glutammico, la tirosina, la lisina e la fenilalanina sono gli aminoacidi più rappresentati in entrambe le tipologie di lenticchie. La farina di grano duro contiene essenzialmente tutti gli aminoacidi, ma tra gli essenziali la lisina risulta poco presente. L'integrazione della farina di grano duro con il 40% di lenticchie (ricche in lisina) migliora l'apporto aminoacidico dell'alimento. Infatti passando dal CTRL (0%) al 40% di sostituzione in lenticchie, la quantità di lisina è variata da 0.32 a 5.16 mg/g (spaghetti crudi lenticchia commerciale) e a 6.22 mg/g (spaghetti crudi lenticchia Ragusa) e da 0.15 a 3.33 mg/g (spaghetti cotti lenticchia commerciale) e a 3.45 mg/g (spaghetti cotti lenticchia Ragusa) con una perdita media in cottura di circa il 40%. Il contenuto polifenolico totale è risultato maggiore nel campione di lenticchia commerciale 3.32 mgGAE/g contro 2.68 mgGAE/g nel campione di lenticchia "Ragusa". Passando dal CTRL (0%) al 40% di sostituzione, i polifenoli totali variano da 0.66 a 1.32 mgGAE/g (spaghetti crudi lenticchia commerciale) e a 1.28 mgGAE/g (spaghetti crudi lenticchia Ragusa) e da 0.16 a 1.15 mgGAE/g (spaghetti cotti lenticchia commerciale) e a 0.89 mgGAE/g (spaghetti cotti lenticchia Ragusa) con una perdita media in cottura di circa del 20 %.

Pasta fortificata ad azione antiossidante. Uso della *Portulaca Oleracea*

VITA DI STEFANO^A, MARIA GRAZIA MELILLI,^B CARLA GENTILE.^A

^a *Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biologiche Chimiche e Farmaceutiche (STEBICEF) Via Archirafi - Palermo PA, Italy.*

^b *Consiglio Nazionale delle Ricerche, Istituto per i Sistemi Agricoli e Forestali del Mediterraneo, (ISAFOM) U.O.S. Catania., Via Empedocle, 58, 95125 Catania
e-mail (vita.distefano@unipa.it)*

Un alimento può essere considerato “funzionale” quando ne è dimostrata la sua influenza benefica su uno o più funzioni del corpo. Conferisce effetti nutrizionali adeguati, per un migliore stato di benessere e salute e/o per la riduzione del rischio di incidenza di una malattia. Diverse sono le tipologie di alimenti funzionali: “fortified products” (prodotti nei quali viene aumentato il contenuto di un componente già presente), “enriched products” (nei quali invece è stato aggiunto un componente normalmente assente), “altered products” (per i quali è stato ridotto o rimosso un componente ‘nocivo’), e “enhanced commodities” (alimenti nei quali la materia prima agricola è stata migliorata mediante apposite tecniche colturali, manipolazione genetica, o altri fattori di produzione). Oggi il mercato per gli alimenti funzionali apre prospettive favorevoli per le strategie d’impresa e può rivestire un’importante area di intervento anche per politiche alimentari e salutistiche, sia nei paesi ricchi che nei paesi in via di sviluppo.

La portulaca (*Portulaca oleracea* L.) è una pianta erbacea annuale distribuita in aree tropicali e subtropicali, che possiede rinomate proprietà antiossidanti, agendo principalmente come scavenger e inibitori della perossidasi lipidica. Questi effetti sono principalmente dovuti ai costituenti fenolici e all’elevata quantità di acidi grassi essenziali. Sono stati preparati presso il CNR ISAFoM di Catania alcuni campioni di pasta fortificata, utilizzando insieme alla farina di grano duro, percentuali diverse di *Portulaca oleracea*. In particolare, la biomassa epigea di 3 popolazioni di portulaca reperite a Caltagirone (Catania), Cassibile (Siracusa) e S. Venerina (Catania) è stata essiccata e finemente macinata. Le polveri ottenute sono state caratterizzate per il contenuto in acidi grassi. La portulaca delle tre diverse popolazioni è stata aggiunta al grano duro alle percentuali di 0 (CTRL)- 5-10-15% per l’ottenimento di pasta fresca (spaghetti). Sui prodotti ottenuti sono state effettuate le analisi GC-MS degli esteri metilici degli acidi grassi (FAMES) e l’attività antiossidante (FRAP e ABTS). Nella media delle 3 popolazioni, passando dal CTRL (0%) al 15% di sostituzione, la quantità di acido palmitico è variata da 0,24 a 0,41 mg g⁻¹ (spaghetti crudi) e da 0,21 a 0,38 mg g⁻¹ (spaghetti cotti); il contenuto in acido oleico da 0,18 a 0,26 mg g⁻¹ con perdite medie in cottura del 14%; il contenuto in acido linoleico è variato da 0,63 a 1 mg di g⁻¹ con una perdita in cottura di circa il 20%. Ovviamente nel “CTRL” non è stato riscontrato acido linolenico, presente invece negli spaghetti arricchiti, con concentrazioni fino a 0,11 mg g⁻¹ (15%) in campioni cotti. Le analisi FRAP e ABTS hanno evidenziato la capacità di aumentare il potenziale antiossidante dei campioni di pasta arricchita rispetto al “CTRL”. Tra i campioni di pasta, quelli fortificati con il 10 e 15% di portulaca “Cassibile” presentavano la più alta attività antiossidante.

Synthesis of “no-light activated” Ciprofloxacin and Norfloxacin derivatives as potential biofilm dispersant agents

ANTONINO N. FALLICA^A, VALERIA CIAFFAGLIONE^A, CARMEN LEONARDI^A, MARIA DICHIARA^A, CARLA BARBARACI^A, ALFIO CATALFO^B, GUGLIELMO FINOCCHIARO^B, GUIDO DE GUIDI^B, EMANUELE AMATA^A, AGOSTINO MARRAZZO^A.

^a Department of Drug Sciences, University of Catania, V.le A. Doria 6, 95125, Catania

^b Department of Chemical Sciences, University of Catania, V.le A. Doria 6, 95125, Catania

e mail antonio.fallica93@gmail.com

Bacterial biofilms consist of a consortium of bacteria enclosed in a chemically heterogeneous matrix that prevents the antibiotics to reach their targets and contributes to the onset of antibiotic resistance.¹ Nitric oxide (NO) is a short-lived radical gasotransmitter that at nanomolar concentrations causes a decrease in the levels of a secondary bacterial intracellular messenger involved in the regulation of the biofilm life cycle, cyclic diguanylate (c-di-GMP), triggering biofilm dispersal.² Our team has developed and synthesized twelve fluoroquinolones derivatives endowed with a NO photodonor moiety in order to spatiotemporally control the delivery of low amounts of NO.

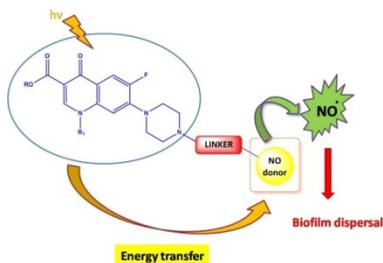


Figura 1

These molecules can act as molecular hybrids: indeed, the energy absorbed from a proper light radiation can be potentially transferred from the fluoroquinolone to the NO donor moiety; in this way it is possible to trigger biofilm dispersal and simultaneously take advantage of the bactericidal effect of the antibacterial scaffold.

Bibliografia

¹ McKay, G.; Nguyen, D.; *Handbook of Antimicrobial Resistance*. **2017**, 203-229.

²Barraud, N.; Schleheck, D.; Klebensberger, J.; Webb, J.S.; Hassett, D.J.; Rice, S.A.; Kjelleberg, S.; *J Bacteriol.* **2009**, 191, 7333-42.

Organotin(IV) butyrates as potential epigenetic modulators: a new approach in cancer therapy

T. FIORE,^A M. GIULIANO,^B G. CALVARUSO,^B C. PELLERITO,^A

^a*Dipartimento di Fisica e Chimica, Università di Palermo, Viale delle Scienze, Parco d'Orleans, 90128 Palermo.*

^b*Dipartimento SteBiCef, Università di Palermo, Viale delle Scienze, Parco d'Orleans, 90128 Palermo.*

e mail tiziana.fiore@unipa.it

The acetylation status of histones is regulated in eukaryotes by two kinds of enzymes, histone acetyltransferases (HATs) and histone deacetylases (HDACs), which are responsible for acetylation and deacetylation of lysines residues in N-terminal tails of histone.¹ Thus acetylation, together with others epigenetic modifications, are involved in the regulation of genes that control vital cellular processes, such as proliferation, cell-cycle regulation and apoptosis.²

Organotin(IV) compounds have found their place among a class of non-platinum chemotherapeutic metallo-pharmaceuticals exhibiting good antitumor activity. The cytotoxicity induced by the different kinds of organotins has been related to several mechanism. Recent study showed that increased histone acetyltransferase (HAT) activity may play additional roles in the antiproliferative activity of organotins.³

Sodium butyrate, which belongs to the class of short chain fatty acids, was the first HDAC inhibitor (HDACI) to be identified.⁴

New triorganotin(IV) and diorganotin(IV) complexes of butyric acid have been synthesized and investigated by elemental analysis, FT-IR spectroscopy, multi-nuclear (¹H, ¹³C and ¹¹⁹Sn) NMR and mass spectrometry (ESI-MS). The ligand and its respective organotin(IV) complexes were screened for cytotoxicity using the MTT assay in hepatocellular carcinoma (HepG2) and human colon carcinoma (HT-29) cell lines. Studies on acetylation state of histone H3 and H4 in treated cells with complexes are in progress.

In triorganotin(IV) complexes, an anionic monodentate butyrate ligand was observed, ester-like coordinating the tin atom on a tetra-coordinated, monomeric environment. FT-IR and NMR findings confirm this situation both in solid state and solution.

In diorganotin(IV) complexes the butyrate seems to act both as monodentate and bidentate ligand allowing a pentacoordinated environment around the tin atom. Experimental data, both in solid state and in solution, suggest that the coordination behaviour of butyrate allows the formation of bis(dicarboxylate tetraorgano-distannoxane) complex in the dimethyltin(IV) derivative, in ratio 1:1 as well as 1:2 organotin(IV)-ligand, whereas dibutyltin(IV) derivative shows two different structures, depending on the ratio dibutyltin(IV):ligand. While synthesis in ratio 1:1 allows bis(dicarboxylate tetrabutyltin(IV) distannoxane) formation, synthesis 1:2 generates dibutyltin(IV) dibutyrate. Observation of spectroscopic data, like the appearance of some characteristic IR bands or the ^{119}Sn NMR signals resulting by differences on environment of tin atoms, suggest the hypothesis of the formation of stannoxanes, as reported in literature.⁵

Biological finding evidenced a clear cytotoxic action of the complexes in HepG2 and HT-29 cells cultures. Organotin(IV) complexes showed cytotoxic activity at low concentrations (0.5 μM) while butyric acid, used as free ligand, did not induce any cytotoxicity in the same concentration range, but it was effective at millimolar concentration. Moreover, organotin(IV)-butyrates like Bu_2SnBA_2 modulate the toxicity of organotin(IV) parents only in HepG2. The complex Bu_2SnBA_2 reduces cell viability in hepatocellular carcinoma cells, probably with apoptotic effects, while in non-tumour liver cells (Chang liver) it induces only very moderate effects, suggesting a potential use as anti-cancer drug.

References

- ¹Grunstein, M.; *Nature*, **1997**, 389, 349-352.
- ²Kwa, F.A.; Balcerczyk A.; Licciardi P.; El-Osta A.; Karagiannis T.C., *Drug Discovery Today*, **2011**, 13/14, 543-546.
- ³Osada S.; Nishikawa J.; Nakanishi T.; Tanaka K.; Nishihara T., *Toxicol Lett*, **2005**, 155, 329-335.
- ⁴Sealy, L.; Chalkley, R.; *Cell*, **1978**, 14, 115-121.
- ⁵Sarma, M.S.; Saha, A.; Roy, A.; *Appl. Organometal. Chem.*, **2008**, 22, 369-377.

Chain length-switching: a supramolecular strategy to drive porphyrin aggregation

MASSIMILIANO GAETA, ROSALBA RANDAZZO, CHIARA MARIA ANTONIETTA GANGEMI, MARIA ELENA FRAGALÀ, ALESSANDRO D'URSO, ROBERTO PURRELLO

Dipartimento di Scienze Chimiche, Università degli Studi di Catania, Viale A. Doria 6, 95125, Catania

e-mail mgaeta@unict.it

Porphyrins represent ideal organic building blocks for the formulation of functional supramolecular nanomaterials. They are stable under a variety of conditions, exhibit robust optical and redox properties, and can be readily fine-tuned to self-assemble and self-organize in predefined architectures.¹ However, one of the most relevant issues associated to porphyrin aggregation is to gain the control of self-assembly processes in aqueous solution in order to create predefined structures. For this reason, the supramolecular aggregation driven by electrostatic and dispersive forces between charged polypeptides and oppositely-charged porphyrins, is a fascinating strategy to direct the self-assembly in water.² In this respect, Zinc(II) meso-tetrakis-(4-sulfonatophenyl)porphyrin (ZnTPPS) is a negative metallo-porphyrins unsteady at acidic conditions (pH < 4.5) leading to related demetalated/protonated forms (H_2TPPS^4 , H_4TPPS^2). Spectroscopic investigations demonstrate that the electrostatic interactions in water between ZnTPPS and positive polylysine affect the overall demetalation/protonation process catalyzing at the same time the formation of porphyrin J-aggregates. Different polylysine chain lengths address the supramolecular system towards a specific aggregation: longer PLLs promote structural reorganizations of the protonated porphyrins leading to more ordered J-aggregates characterized by enhanced supramolecular chirality.³

Bibliografia

¹ Medforth, C. J.; Wang, Z.; Martin, K. E.; Song, Y.; Jacobsen, J.L.; Shelnutt, J.A., *Chem. Commun.* **2009**, 7261–7277; Gaeta, M.; Oliveri, I.P.; Fragalà, M.E.; Failla, S.; D'Urso, A.; Di Bella, S.; Purrello, R., *Chem. Commun.*, **2016**, 52, 8518–8521.

² Zhang, L.; Liu, M., *J. Phys. Chem. B*, **2009**, 113, 14015–14020; R. Purrello, E. Bellacchio, S. Gurrieri, R. Lauceri, A. Raudino, L. M. Scolaro, and A. M. Santoro, *J. Phys. Chem. B* 102 (1998) 8852–8857;

³ Gaeta, M.; Raciti, D.; Randazzo, R.; Gangemi, C.M.A.; Raudino, A.; D'Urso, A.; Fragalà, M.E.; Purrello, R., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2018**, 57, 10656–10660.

Struttura vs sequenza: i microRNAs una ricca varietà di conformazioni

C. M. A. GANGEMI,^A S. ALAIMO,^B A. PULVIRENTI,^B SARA GARCIA-VIÑUALES,^C
D. MILARDI,^C A. FALANGA,^D M. E. FRAGALÀ,^A G. OLIVIERO,^D G. PICCIALLI,^E
N. BORBONE,^E A. FERRO,^B A. D'URSO,^{A*} C.M. CROCE,^{F*} R. PURRELLO^{A*}

e-mail gangemichiara@unict.it

I microRNA sono una classe di piccole sequenze single-strand, non codificanti ed evolutionalmente conservate con un ruolo cruciale nel metabolismo cellulare. Ad oggi sono state identificate più di 1500 miRNA, lo squilibrio nel loro livello di espressione è stato spesso associato all'insorgenza ed allo sviluppo di differenti malattie quali cancro, disordini genetici e alterazione delle funzioni del sistema immunitario.[1] Per tali ragioni i miRNA rappresentano un nuovo target biologico, per chimici, biochimici e bioinformatici allo scopo di progettare microRNA multi-target, in grado di funzionare come terapia per malattie causate da uno squilibrio dei miRNA [2]. Nonostante diversi studi siano stati dedicati alla comprensione della loro attività, il loro meccanismo di azione non è stato del tutto chiarito. In questo contesto un notevole interesse è cresciuto intorno alle strutture adottate da queste sequenze, che insieme alla complementarità nella sequenza nucleotidica rappresenta un importante parametro per la specificità del binding. Il possibile arrangiamento dei miRNA in strutture 3D può agire nella regolazione post-trascrizionale, influenzando l'affinità e la specificità nei confronti dei loro target.[3] Tramite misure di dicroismo circolare e differenti esperimenti spettroscopici è stato possibile dimostrare la presenza in soluzione di strutture differenti rispetto agli arrangiamenti single strand. Inoltre, i dati preliminari condotti su alcune sequenze endogene e sintetiche di microRNAs, sembrano suggerire la presenza di differenti strutture complesse, che potrebbero assumere un ruolo cruciale nel meccanismo di azione di queste piccole sequenze nucleotidiche.

Bibliografia

- [1] H. Dong, J. Lei, L. Ding, Y. Wen, H. Ju and X. Zhang, Chem. Rev. 113 (2013) 6207-6233.
[2] A. Laganà, M. Acunzo, G. Romano, A. Pulvirenti, D. Veneziano, L. Cascione, R. Giugno, P. Gasparini, Dennis Shasha, A. Ferro and C. M. Croce Nucleic Acids Res. 42 (2014) 5416-5425.
[3] A. Belter, D. Gudanis, K. Rolle, M. Piwecka, Z. Gdaniec, M. Z. Naskre, t-Barciszewska and J. Barciszewski, PLoS One 9 (2014) e113848.

Tensioattivi supramolecolari a base calixarenica: studio all'interfaccia solido-liquido mediante QCM-D

GIUSEPPA IDA GRASSO,^A ROSSELLA MIGLIORE,^A PAOLA MILANA,^A GIUSEPPE ARENA,^A CARMELO SGARLATA.^A

^a *Dipartimento di Scienze Chimiche, Università degli Studi di Catania, Viale A. Doria 6, 95125, Catania*
e-mail gigrasso@unict.it

Le innumerevoli applicazioni che trovano i tensioattivi in vari ambiti tecnologici e industriali, come quello cosmetico e delle nanosuperfici, o quello biologico e del *drug delivery*, hanno stimolato la ricerca verso la progettazione di nuovi sistemi anfifilici con caratteristiche sempre più specifiche ed eco-compatibili. In questo contesto si collocano i tensioattivi supramolecolari, ovvero quei tensioattivi le cui parti anfifiliche si assemblano mediante interazioni non covalenti. Come i tensioattivi classici, anche questi sistemi sono in grado di organizzarsi tra loro formando aggregati molecolari bi o tridimensionali come micelle, bilayers, vescicole.

Studi calorimetrici in soluzione su nuovi tensioattivi supramolecolari costituiti da un *host* macrociclico, il p-solfonatocalix[4]arene, e da opportuni tensioattivi cationici aventi differente lunghezza del segmento idrofobico e natura della testa polare, hanno messo in evidenza come la presenza dell'*host* calixarenico influenza fortemente la natura chimica e le proprietà anfifiliche dei tensioattivi cationici.¹ Poiché le applicazioni nei vari ambiti sopra citati implica un'adeguata comprensione delle proprietà di questi sistemi non solo in soluzione omogenea, nel presente lavoro è stato studiato il processo di adsorbimento dei tensioattivi supramolecolari all'interfaccia solido-liquido^{2,3} mediante microbilancia a cristalli di quarzo (QCM-D).⁴ Tali esperimenti hanno permesso di ottenere e confrontare criticamente le isoterme di adsorbimento dei tensioattivi supramolecolari e convenzionali e di mettere così in evidenza il ruolo cruciale del segmento idrofobico e della natura della testa polare nei processi all'interfaccia.

Bibliografia

¹ Migliore R., Relazione 1° anno dottorato, **2017**.

² Striolo A., Grady B. P., *Langmuir*, **2017**, 33, 8099 – 8113.

³ Mivehi L., Bordes R., Holmberg K., *Langmuir*, **2011**, 27, 7549–7557.

⁴ Kasemo B., *Surface Science*, **2002**, 500, 656 – 677.

Sistemi pirimido[5,4-g]indolizini e pirimido[4,5-c]pirrolo[1,2-a]azepinici come potenziali agenti fotosensibilizzatori

VIRGINIA SPANÒ,^A ANGELA INGARRA,^A ZHAO YUXIA,^B BIN HE,^C ANNA CARBONE,^A ALESSANDRA MONTALBANO,^A PAOLA BARRAJA.^A

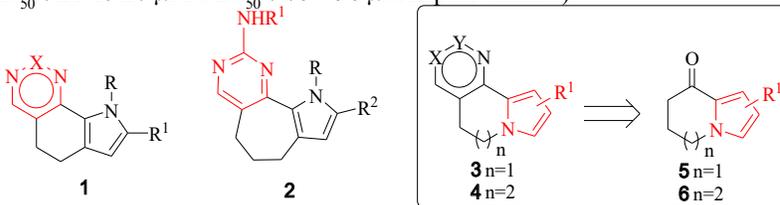
^aDipartimento di Scienze e Tecnologie Biologiche Chimiche e Farmaceutiche, Università di Palermo, Via Archirafi 32, 90123, Palermo

^bTechnical Institute of Physics and Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Pechino

^cNational Engineering Research Center for Biomaterials, Sichuan University, Chengdu

e-mail angelamaria.ingarra@unipa.it

La Terapia Fotodinamica (PDT) è un'interessante opzione terapeutica nel trattamento di svariati tumori, come i carcinomi all'esofago e ai polmoni. Sino a oggi la PDT è stata utilizzata per il trattamento di malattie della pelle quali psoriasi, vitiligo, linfoma cutaneo a cellule T (CTCL), così come per il trattamento di malattie autoimmuni mediate dalle cellule T (sclerosi sistemica progressiva, lupus eritematoso, pemphigo vulgaris e AIDS).¹ Negli anni passati, il nostro gruppo di ricerca si è occupato dello studio di varie classi di composti che presentassero le caratteristiche degli agenti fotosensibilizzanti. Tra questi, le *pirrolo[3,2-h]chinazoline 1* e le *pirrolociclohepta[1,2-d]pirimidine 2* hanno dimostrato promettenti proprietà fotosensibilizzanti, risultando in alcuni casi più attivi dei farmaci di riferimento (GI₅₀ 0.21-15.20 μM e EC₅₀ 0.06-4.96 μM rispettivamente).²



Considerati gli interessanti risultati ottenuti, si è pensato di valutare come la rotazione dell'anello pirrolico, nei sistemi pirimidoindolizini **3** e pirimido-pirroloazepinici **4**, influenzasse l'attività fototossica dei nuovi composti. Ideali *building blocks* per la sintesi dei nuovi sistemi eterociclici si sono dimostrati i chetoni di tipo **5,6** facilmente funzionalizzabili in α al carbonile, permettendo così l'introduzione del secondo centro reattivo, che insieme al gruppo carbonilico, ha reso possibile la chiusura dell'anello pirimidinico attraverso la reazione con guanidine variamente sostituite. Le proprietà chimico-fisiche e l'attività fototossica dei nuovi composti verranno valutate. I risultati saranno discussi.

Bibliografia

¹ Yanoa, S.; Hirohara, S.; Obata, M.; Hagiya, Y.; Ogura, S.; Ikeda, A.; Kataoka, H.; Tanaka, M.; Joh, T.; *J. Photochem. Photobiol. C*, **2011**, 12, 46.

² Barraja, P.; Caracausi, L.; Diana, P.; Montalbano, A.; Carbone, A.; Salvador, A.; Brun, P.; Castagliuolo, I.; Tisi, S.; Dall'Acqua, F.; Vedaldi, D.; Cirrincione, G.; *ChemMedChem*, **2011**, 6, 1238; Spanò, V.; Frasson, I.; Giallombardo, D.; Doria, F.; Parrino, B.; Carbone, A.; Montalbano, A.; Nadai, M.; Diana, P.; Cirrincione, G.; Freccero, M.; Richter, S. N.; Barraja, P.; *Eur. J. Med. Chem.*, **2016**, 123, 447.

Progettazione e sintesi di nuovi complessi metallici potenziali inibitori di FGFR4

MERY LA FRANCA, ROBERTO SPATOLA, MARIA VALERIA RAIMONDI, GIAMPAOLO BARONE

*Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biologiche Chimiche e Farmaceutiche
Università degli studi di Palermo, Viale delle Scienze, Edificio 17, 90128, Palermo
e-mail mery.lafranca@unipa.it*

I pathways di segnalazione che coinvolgono il recettore del fattore di crescita dei fibroblasti 4 (FGFR4) risultano alterati in varie tipologie di tumori^[1] ed è stato dimostrato come l'interruzione della segnalazione FGF19/FGFR4 interrompa la proliferazione e induca l'apoptosi delle cellule tumorali, offrendo grandi promesse terapeutiche.^[2-4] Allo scopo d'individuare nuovi leganti FGFR4, sono stati effettuati degli studi di modellistica molecolare (Fig. 1) che, riferendosi alla struttura del ponatinib, noto inibitore di FGFR4,^[5] il cui utilizzo è ostacolato dall'elevata lipofilia e da effetti secondari, hanno consentito di generare una "Drug Discovery Library" di oltre 30 nuovi potenziali ligandi dotati di un sito chelante per ioni metallici, attivabili in ambiente ipossico, caratteristico delle cellule tumorali. Le due molecole più promettenti, tra quelle disegnate, sono state sintetizzate.

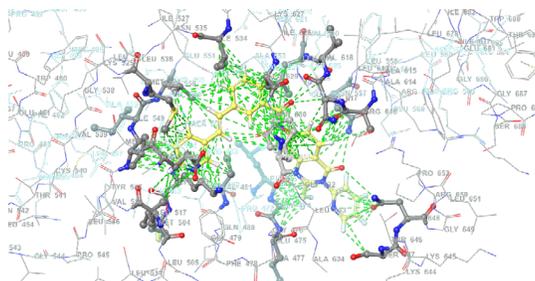


Figura 1. Docking molecolare di uno dei nuovi potenziali inibitori di FGFR sintetizzati

Bibliografia

- ^[1]Hagel M. et al. *Cancer Discovery* **2015**, 10.1158/2159-8290 .
- ^[2]Ruhe, J.E. et al. *Cancer Res* **2007**, 67, 11368– 11376.
- ^[3]Birrer, M.J. et al. *J. Clin. Oncol* **2007**, 25, 2281–2287.
- ^[4]Zaid, T.M. et al. *Clin. Cancer Res* **2013**, 19, 809–820.
- ^[5]Tucker, J.A. et al. *Structure* **2014**, 22, 1764–1774.

A new route to thermo-responsive nanocarriers by selective adsorption of PNIPAAms onto halloysite surfaces

CAVALLARO G., LAZZARA G., LISUZZO L., MILIOTO S., PARISI F.

Physics and Chemistry Department, University of Palermo, Viale delle Scienze pad. 17, 90128, Palermo, Italy

e-mail giuseppe.lazzara@unipa.it

Halloysite nanotubes were functionalized with stimuli responsive polymers to generate smart nanohybrids. Poly(N-isopropylacrylamide)-co-methacrylic acid (PNIPAAm-co-MA) was selectively adsorbed onto halloysite inner surface by exploiting electrostatic interactions. Amine terminated PNIPAAm polymer selectively interacts with the outer surface of the nanotubes. Dynamic light scattering and differential scanning calorimetry highlighted that the specific polymer/HNT interaction site influences the structure and the thermodynamics of the hybrid systems (Figure 1). The incorporation of PNIPAAm-co-MA within lumen promoted the lateral interactions between the polymer molecules favoring the dehydration process, while the adsorption of PNIPAAm-NH₂ on the HNT outer surface favored the formation of aggregates because of the hydrophobic interactions. The drug release kinetics results, investigated by using Diclofenac as model, allow concluding that the specific site adsorption of PNIPAAms/HNT influence the thermo-responsive behavior in terms of structural and thermodynamic properties as well as release capacity of drugs. This work represents a further step toward the possibility to control the delivery conditions of active species, which is a key point for many technological applications.

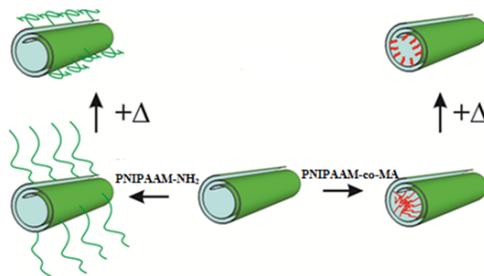


Figure 1. Schematic representation of PNIPAAm-NH₂ and PNIPAAm-co-MA interaction with HNT and effect of temperature on the resulting hybrids.

Reference

Cavallaro G.; Lazzara G.; Lisuzzo L.; Milioto S.; Parisi F. *Nanotechnology* 2018, 29, 325702.

Computer-aided approach to design protein *Leishmania major* Disulfide Isomerase(LmPDI) inhibitors

CARMEN LEONARDI,^A VALERIA PITTALÀ,^A VALERIA CIAFFAGLIONE,^A ANTONINO N. FAL-LICA,^A SEBASTIANO INTAGLIATA,^A SARA ABDELGHANY,^B NOUREDDINE BEN KHALAF,^B

^a Dipartimento di Scienze del Farmaco, Università di Catania, Viale A. Doria 6, 95125, Catania

^bDepartment of Life Sciences, College of Graduate Studies, Arabian Gulf University, Road 2904, Building 293, Manama, 329, Manama, Bahrain
e-mail vpittala@unict.it

Leishmaniasis is an infectious disease caused by parasites of the genus *Leishmania* and it transmitted by the bite of a sand fly. Leishmaniasis constitutes a heterogeneous group of diseases that affect millions of people in tropical and subtropical areas of the world. Tools available for Leishmaniasis control are limited: to date, no vaccine against *Leishmania* infection is available and drugs are toxic and expensive¹. Protein disulfide isomerase (PDI, EC 5.3.4.1) is an endoplasmic reticulum–located protein that belongs to the thioredoxin superfamily. PDI plays a central role in the process of assisting folding of newly synthesized proteins. In particular, PDI assists disulfide bond formation, breakage, or rearrangement in all non-native proteins. Moreover, PDI was also described as having molecular chaperone and anti-chaperone activities. Previous studies strongly suggest that LmPDI could constitute a suitable drug target for *L. Major* infection and play an essential role in virulence². We identified Hexachlorophene as a potent inhibitor of LmPDI and parasite infection *in vitro*.

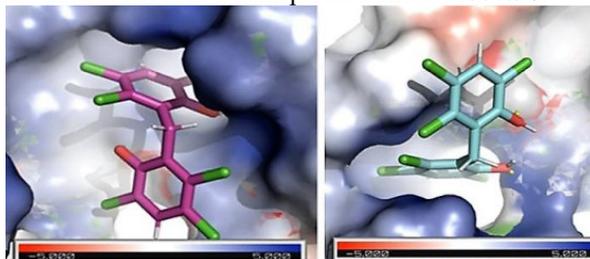


Figure 1. Hexachlorophene interaction prediction from docking analysis with LmPDI active sites

In this communication, we will report on a computer-aided approach to design potent and specific LmPDI inhibitors. The use of fragment-based virtual screening allowed a deeper understanding of inhibitors mode of action on LmPDI active sites and the design of small molecules that showed inhibition the target reductase activity. This study led to the identification of new lead molecules that can be considered as hit compounds to design novel drugs more specific and less toxic for Leishmaniasis. Obtained results will be presented at the meeting.

Bibliografia

¹Akhoundi, M., Downing, T., Votýpka, J., Kuhls, K., Lukeš, J., Cannet, A., Ravel, C., Marty, P., Delaunay, P., Kasbari, M., Granouillac, B., Gradoni, L. and Sereno, D. *Mol. Asp. Med.*, **2017**,57, 1–29

²Ben Khalaf N, De Muylder G, Louzir H, McKerrow J, Chenik M. *Parasitol. Res.*, **2012**, 110, 1911–7

Attività sinergica di nanoparticelle di argento fotosintetizzate con antibatterici classici

PAOLO LO MEO,^A LORENZO BARBARA,^A ROSAMARIA FONTANA,^A ANTONELLA DI VINCENZO,^A MARCO RUSSO,^B GIUSEPPE GALLO.^A

^a Dip. STEBICEF, Università di Palermo, V.le delle Scienze ed. 17, 90128, Palermo

^b ISMN-CNR Palermo, Via Ugo La Malfa 153, 90146 Palermo (Italy)
e-mail paolo.lomeo@unipa.it

L'adozione di tecniche sintetiche innovative e a basso impatto ambientale nel campo dei nanocompositi può portare non solo ad un beneficio relativo a costi e tempi di produzione, ma anche a un più proficuo utilizzo dei prodotti finali in ambiti come quello biologico, dove la tossicità di sostanze utilizzate per reazioni di tipo classico altererebbero i risultati ottenuti. Nell'ambito di tale problematica, ci siamo interessati alla sintesi tramite riduzione fotochimica di sistemi compositi costituiti da nanoparticelle di Ag e poliammino-ciclodestrine (ACD).¹⁻² La reazione, che prevede l'irradiazione per pochi minuti di una soluzione di Ag⁺ e ACD mediante una lampada alogena commerciale, decorre in pochi minuti e porta alla formazione del composito nanoparticellare (ACD-AgNP) senza che rimangano residui di altri composti chimici indesiderati. Le ACD-AgNP ottenute sono state testate con successo per la capacità di inibire la crescita batterica contro vari ceppi tester (*Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa* e *Staphylococcus aureus*). Inoltre, la loro associazione con antibiotici classici come l'ampicillina o l'apramicina, provoca un potenziamento dell'azione di entrambe le componenti, riducendone così il quantitativo da utilizzare per raggiungere gli stessi livelli di inibizione della crescita batterica. La sinergia che intercorre tra antibiotici e ACD-AgNP, validata utilizzando come modello matematico l'equazione di Syberg, ne suggerisce, pertanto, un possibile uso in prospettiva come dispositivo antibatterico.

Bibliografia

¹ Russo, M.; Meli, A.; Sutura, A.; Gallo, G.; Chillura Martino, D.; Lo Meo, P.; Noto, R. *RSC Adv.* **2016**, *6*, 40090-40099.

² Russo, M.; Chillura Martino, D.; Caponetti, E.; Lo Meo, P. *ChemistrySelect* **2018**, *3*, 3048-3055.

Sintesi e attività fotocatalitica di materiali compositi ciclodestrina/ossido di grafene/nanoparticelle di argento

PAOLO LO MEO,^A ALBERTO D'ARPA,^A ANTONELLA DI VINCENZO,^A GIUSEPPE LAZZARA,^B DELIA CHILLURA MARTINO.^A

^a Dip. STEBICEF, Università di Palermo, V.le delle Scienze ed. 17, 90128, Palermo

^b Dip. di Fisica e Chimica, Università di Palermo, V.le delle Scienze ed. 17, 90128, Palermo

e-mail paolo.lomeo@unipa.it

L'ossidazione fotocatalitica costituisce una possibile via per la degradazione di agenti inquinanti, quali coloranti o fenoli,¹ che ha visto negli ultimi anni notevoli sviluppi e la messa a punto di catalizzatori sempre più efficienti. In particolare, sono stati recentemente proposti a questo scopo materiali a base nanoparticelle di Ag supportate su Ossido di Grafene ridotto (Ag/RGO).² In questo lavoro dimostriamo come sia possibile migliorare notevolmente l'attività di tali fotocatalizzatori associandoli a sistemi *host* supramolecolari a base di ciclodestrine, in grado di concentrare il substrato da fotodegradare in prossimità dei centri catalitici propriamente detti. In particolare, sono stati messi a punto due distinti materiali compositi in cui il fotocatalizzatore Ag/RGO è stato disperso in una matrice di nanopugna di policarbammato-ciclodestrina o di poliammino-ciclodestrina. Tali materiali sono stati testati per la degradazione di tre substrati modello (Rodamina B, Metilarancio e Bisfenolo A, Figura 1), mostrando un miglioramento nella attività rispetto al Ag/RGO, nonché una eccellente riciclabilità.

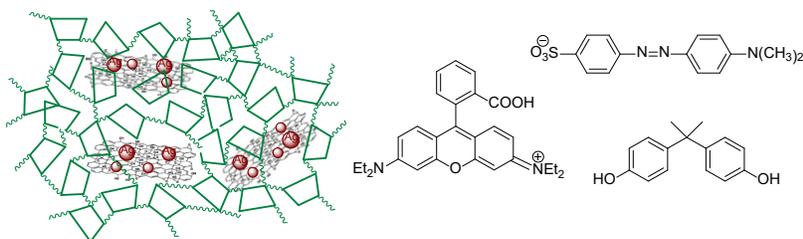


Figura 1

Bibliografia

¹ Reddy, P. V. L.; Kim, K.-H.; Kavitha, B.; Kumar, V.; Raza, N.; Kalagara, S. *Journal of Environmental Management* **2018**, *213*, 189-205.

² Divya, K. S.; Chandran, A.; Reethu, V. N.; Mathew, S. *Appl. Surf. Sci.* **2018**, *444*, 811-818.

Development of pyridin-2-one derivatives as non-covalent inhibitors of immunoproteasome

SANTINA MAIORANA,^A ROBERTA ETTARI,^A ANTONIO LAVECCHIA,^B MARIA ZAPPALÀ^A

^aDepartment of Chemical, Biological, Pharmaceutical and Environmental Sciences, University of Messina, Viale Annunziata, 98168 Messina

^bDepartment of Pharmacy, "Drug Discovery" Laboratory, University of Napoli Federico II, Via Domenico Montesano 49, 80131 Napoli, Italy
e-mail smaiorana@unime.it

The ubiquitin-proteasome pathway is the major non-lysosomal proteolytic system, which regulates the levels of several proteins involved in cell cycle progression and apoptosis. In addition to the constitutive proteasome, vertebrates possess immunoproteasome (i20S), mainly expressed in lymphocytes and monocytes; thus, a preferential inhibition of immuno-core particles is currently considered a novel promising strategy for the treatment of hematologic malignancies, including multiple myeloma.¹ In this context, we developed a new series of amide derivatives as immunoproteasome inhibitors (Fig. 1) based on the lead compound **1**, previously synthesised in our laboratories, which proved to selectively inhibit β 1i subunit with a K_i of 2.23 μ M. The designed compounds are characterized by structural variations at the *N*-substituent and at the methylene linker between the pyridone scaffold and the amide function of compound **1**.

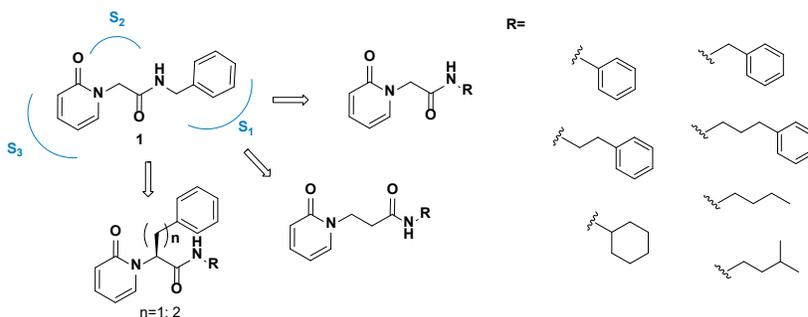


Figure 1

With this SAR study we identified a panel of active inhibitors with K_i values in the low micromolar or submicromolar range towards one or two chymotrypsin-like activities of immunoproteasome. The non-covalent binding mode of these inhibitor was corroborated by docking simulations into the 20S proteasome crystal structure.

References

¹Ettari, R.; Previti, S.; Bitto, A.; Grasso, S.; Zappalà, M., *Curr. Med. Chem.*, **2016**, *23*, 1217-1238.

Development of Novel Peptide-Based Michael Acceptors as antitrypanosomal agents

SANTINA MAIORANA,^A ROBERTA ETTARI,^A SANDRO COSCONATI,^B MARIA ZAPPALÀ^A

^aDepartment of Chemical, Biological, Pharmaceutical and Environmental Sciences, University of Messina, Viale Annunziata, 98168 Messina

^bDiSTABiF, University of Campania Luigi Vanvitelli, Via Vivaldi 43, 81100 Caserta
e-mail smaiorana@unime.it

Human African Trypanosomiasis (HAT), commonly known as sleeping sickness, is an endemic parasitic disease occurring in 36 countries in sub-Saharan Africa, with around 10.000 new cases reported each year. HAT is caused by two subspecies of protozoa, *Trypanosoma b. gambiense* and *T. b. rhodesiense*. Literature evidences assess that targeting rhodesain, the major cysteine protease of *T. b. rhodesiense*, could be a promising strategy for HAT treatment.¹ In this context, our research group has been involved, in the last decade, in the discovery of novel rhodesain inhibitors, bearing a reactive warhead. In particular, compound **1** showed a k_{2nd} value of $67,000 \times 10^3 \text{ M}^{-1} \text{ min}^{-1}$ coupled with a binding affinity expressed by a K_i value of 38 pM.² The strong potency towards rhodesain was coupled with a good antitrypanosomal activity (EC_{50} value against *T. b. brucei* of 2.97 μM). Based on these results, we developed **2a-h**, **3** and **4** derivatives (Fig. 1) with the aim to increase target selectivity and the activity against the parasite; structural variations at P1', P2 and P3 sites were explored whereas the reactive vinyl ketone warhead was maintained unchanged.

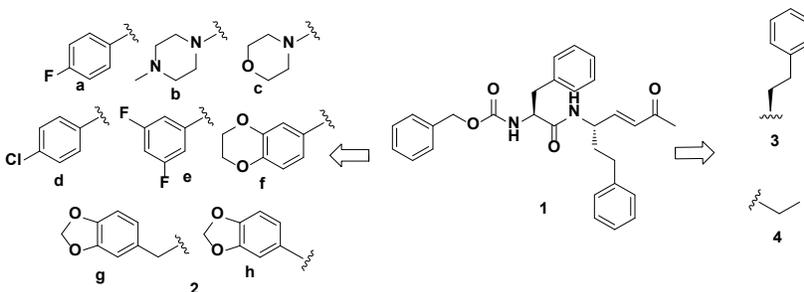


Figure 1

The resulting compounds were tested against rhodesain in order to evaluate their kinetic profile, allowing us to obtain potent inhibitors for further development. Docking studies allowed us to clarify the binding mode of the active inhibitors.

References

¹ Ettari, R., Previti, S., Tamborini, L., Cullia, G., Grasso, S., Zappalà, M., *Mini Rev Med Chem.*, **2016**, 16, 1374.

² Previti, S., Ettari, R., Cosconati, S., Amendola, et al. *J.Med.Chem.*, **2017**, 60, 6911.

Nuove applicazioni di glucoammino oligo-fenilenetilenili

AURORA MANCUSO, PAOLA BONACCORSI, TANIA M. G. SALERNO, ANNA BARATTUCCI.

*Dipartimento di Scienze Chimiche, Biologiche, Farmaceutiche ed Ambientali (ChiBioFarAm), Università di Messina, Viale F. Stagno d'Alcontres 31, 98166, vill. S. Agata - Messina
e-mail mancusoaurora@gmail.com*

Gli Oligo-fenilenetilenili (OPEs) sono oligomeri lineari, caratterizzati da un'elevata coniugazione tra frammenti aromatici ed unità etinileniche che ne conferisce interessanti proprietà ottiche ed elettroniche. Grazie ad esse, negli ultimi decenni, gli OPEs hanno ottenuto un ruolo rilevante nel campo della sensoristica, dell'elettronica e della biologia.¹ Negli ultimi anni, il mio gruppo di ricerca si è occupato della sintesi di ammino-OPEs (che assorbono nella regione dell'UV) funzionalizzati da residui glucosidici terminali, che hanno trovato applicazione come *dyes* in *bioimaging* e in terapia fotodinamica superficiale (PDT).²

Proseguendo con lo studio delle possibili applicazioni in campo biomedico, di recente abbiamo realizzato opportune modifiche strutturali a partire dai composti precedentemente sintetizzati. Tra queste, l'introduzione di una o due cariche positive sullo scheletro coniugato (Figura 1) ha permesso alle nuove specie di interagire con lo scheletro polianionico del DNA.³ Lo studio della natura dell'interazione è il primo oggetto di questa comunicazione.

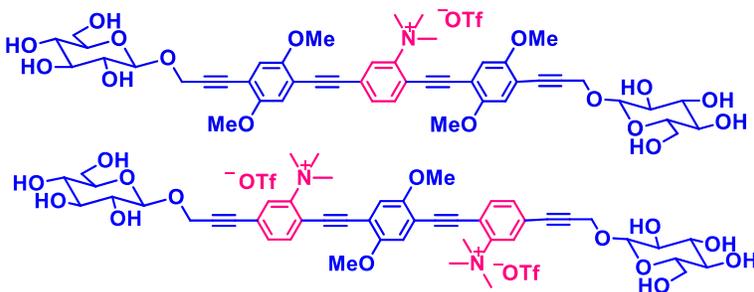


Figura 1

Inoltre, al fine di superare il limite di utilizzo degli ammino-OPEs in PDT di superficie, si sono studiate delle opportune modifiche volte a consentirne l'ancoraggio a nanoparticelle drogate con lantanidi in grado di dare *upconversion*, con lo scopo di ottenere *dyes* maggiormente impiegabili grazie all'assorbimento nella regione del NIR di questi nanomateriali (Figura 2).

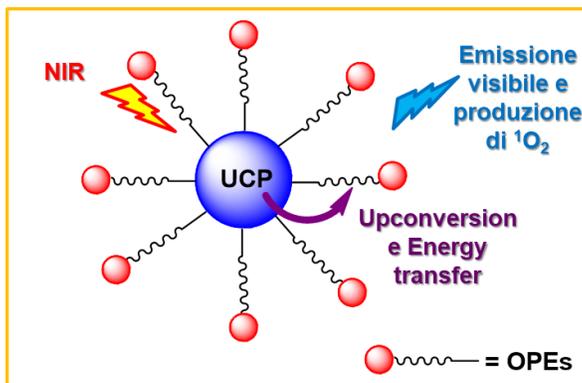


Figura 2

Bibliografia

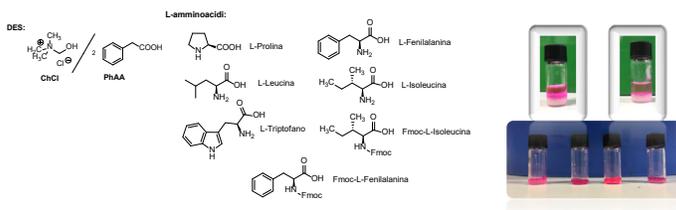
- [1] Kaliginedi, V.; Moreno-García, P.; Valkenier, H.; Hong, W.; García-Suárez, V. M.; Buitero, P.; Otten, J. L. H.; Hummelen, J. C.; Lambert, C. J.; Wandlowski, T. *J. Am. Chem. Soc.*, **2012**, 134, 5262.
- [2] Deni, E.; Zamarrón, A.; Bonaccorsi, P.; Carreño, M. C.; Juarranz, Á.; Puntoriero, F.; Sciortino, M. T.; Ribagorda, M.; Barattucci, A. *Eur. J. Med. Chem.* **2016**, 111, 58. Barattucci, A.; Deni, E.; Bonaccorsi, P.; Ceraolo, M. G.; Papalia, T.; Santoro, A.; Sciortino, M. T.; Puntoriero, F. *J. Org. Chem.* **2014**, 79, 5113.
- [3] Mancuso, A.; Barattucci, A.; Bonaccorsi, P.; Giannetto, A.; La Ganga, G.; Musarra-Pizzo, M.; Salerno, T. M. G.; Santoro, A.; Sciortino, M. T.; Puntoriero, F.; Di Pietro, M. L. *Chem. Eur. J.* **2018**, 24, 16972.

Eutectogel: materiali per il risanamento ambientale

ALESSANDRO MELI, SALVATORE MARULLO, CARLA RIZZO, RENATO NOTO, FRANCESCA D'ANNA.

Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biologiche, Chimiche e Farmaceutiche, Università degli Studi di Palermo, Viale delle Scienze Ed. 17, 90128, Palermo e-mail salvatore.marullo@unipa.it

I gel supramolecolari sono materiali nanostrutturati originati dal *self-assembly* di molecole a basso peso molecolare in soluzioni diluite e trovano numerose applicazioni, tra cui il risanamento ambientale.¹ Oltre che nei comuni solventi molecolari, i gel possono essere formati anche in solventi non-convenzionali come i liquidi ionici e *Deep Eutectic Solvents* (DES) formando ionogel² e *eutectogel*,³ rispettivamente. I DES sono miscele che presentano una temperatura di fusione definita, minore di quella dei singoli componenti, e spesso sono liquidi a temperatura ambiente.⁴ I componenti dei DES sono spesso specie non tossiche e ciò li rende solventi più ecocompatibili rispetto ai comuni solventi organici. Alla luce di ciò, sono stati preparati dei gel formati da L-amminoacidi nel DES cloruro di colinio (ChCl) e acido fenilacetico (PhAA) 1:2.



I gel ottenuti sono stati caratterizzati tramite misure di stabilità termica, e misure reologiche; mentre la loro morfologia è stata indagata tramite misure SEM e POM. I materiali ottenuti sono stati utilizzati come adsorbenti nanostrutturati per la rimozione di coloranti cationici da fasi acquose. I risultati ottenuti mostrano che questi *eutectogel* permettono una rapida ed efficiente rimozione dei coloranti ed inoltre possono essere riciclati per diversi cicli di utilizzo.

Bibliografia

- Okesola, B. O.; Smith, D. K. *Chem. Soc. Rev.* **2016**, *45*, 4226.
 Marr, P. C.; Marr, A. C. *Green Chem.* **2016**, *18*, 105.
 Marullo, S.; Meli, A.; Giannici, F.; D'Anna, F. *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2018**, *6*, 12598.
 Smith, E. L.; Abbott, A. P.; Ryder, K. S. *Chem. Rev.* **2014**, *114*, 11060.

Thermal analysis for the characterization of waterlogged archaeological woods consolidated with Halloysite nanotubes/polyethylene glycol composites

CAVALLARO G., LAZZARA G., MILIOTO S., PARISI F.

Physics and Chemistry Department, University of Palermo, Viale delle Scienze pad. 17, 90128, Palermo, Italy
e-mail stefana.milioto@unipa.it

Recently, scientists have paid attention to develop materials for the consolidation of cellulose-based artefacts (such as paper and wooden materials). Although some of them appear promising, there are numerous questions that are still to be solved. With this in mind, we prepared a range of consolidants based on halloysite nanotubes and polymers (wax and polyethilenglycol). Halloysite is a natural clay, abundant over the world, no-toxic and inexpensive. The addition of halloysite nanotubes to polymer matrices might cause an improvement of the mechanical and thermal properties. Another interesting aspect of using halloysite as nanofiller is the ability to load active chemical agents into the lumen for a controlled release. Thermal and mechanical properties were determined for the halloysite based nanocomposites at various compositions. To the light of these insights, samples of waterlogged archaeological wood and paper were consolidated and protected. Thermal analysis was carried out to investigate the degradation of the materials. DMA experiments were carried to investigate the mechanical performance of the nanomaterials and the success of the consolidation procedure.

In particular, the consolidation of archaeological wooden finds is an extremely complex process as the main difficulty is due to the wood high sensitivity to the environment. Due to extreme degradation conditions, the wood loses mechanical resistance and becomes similar to a sponge. Consequently, the drying process assumes a crucial role converting the wood into a compact material which has lost the original structure. Moreover, aging processes typically provides acidic pH. In this case, a consolidation flanked by chemical protection is required. A protocol to introduce a basic reservoir based on calcium hydroxide confined into the halloysite lumen is proposed.

References

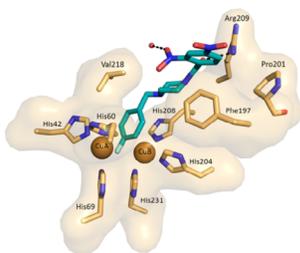
Cavallaro, G.; Milioto, S.; Parisi, F.; Lazzara, G. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2018**, *10*, 27355.

The 1-(4-fluorobenzyl)piperazine fragment for the development of novel tyrosinase inhibitors

SALVATORE MIRABILE,^A SERENA VITTORIO,^A MARIA PAOLA GERMANÒ,^A
 ROSARIA GITTO,^A ANTONIO RAPISARDA,^A SONIA FLORIS,^B ANTONELLA FAIS,^B
 AYELET FISHMAN,^C LAURA DE LUCA^A

^aDepartment CHIBIOFARAM, University of Messina, Via Palatucci, I-98168, Messina, Italy. ^bDepartment of Life Science and Environment, University of Cagliari, I-09042 Monserrato, Cagliari, Italy. ^cDepartment of Biotechnology and Food Engineering, Technion-Israel Institute of Technology, Haifa, 3200003, Israel
 e-mail smirabile@unime.it

Tyrosinase (TYR, EC 1.14.18.1) is involved in the production of melanin in bacteria, fungi, plants and animals, including humans. Recently, the role of TYR was studied in order to identify new therapeutic strategy for skin hyper-pigmentation and melanoma in humans. Among the different TYR isoforms from various organisms, the catalytic central domain is the most conserved region, which comprises six histidine residues and the two copper ions (CuA and CuB). By combining theoretical and experimental studies we demonstrated that the 4-fluorobenzylpiperazine fragment exerts a crucial role during the recognition into the catalytic site of TYRs¹⁻² (Figure).



Among the large series of synthesized molecules, the 1-[(4-fluorophenyl)methyl]-4-(2-nitrobenzoyl)piperazine proved to be potent inhibitor toward TYR from *Agaricus bisporus* (MTYR). This compound demonstrated to inhibit MTYR in a competitive fashion and displayed low cytotoxicity in B16F10 mouse melanoma cells. The follow-up was the synthesis of several homologues by inserting an additional methylene group into the aroyl fragment. As result we identified a further series of TYR inhibitors bearing the 4-fluorobenzylpiperazine chemical motif. These new data furnished additional information about the SAR for this class of TYR inhibitors from synthetic source.

Bibliografia

- ¹ Ferro, S.; Deri, B.; Germanò, M.P.; Gitto R.; Ielo L.; Buemi, M.R.; Certo, G.; Vittorio, S.; Rapisarda, A.; Pazy, Y.; Fishman A.; De Luca L.; *J Med Chem*, **2018**, 61, 3908.
- ² Ferro, S.; De Luca, L.; Germanò, M.P.; Buemi, M.R.; Ielo, L.; Certo, G.; Kanteev, M.; Fishman A.; Rapisarda, A.; Gitto, R.; *Eur J Med Chem*, **2017**, 125, 992.

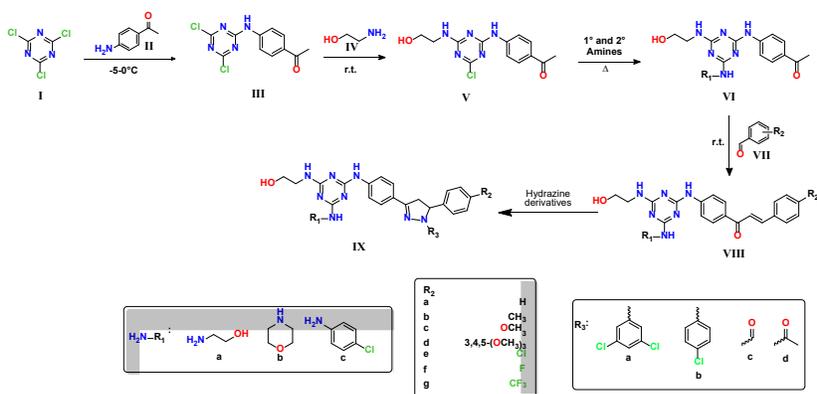
Synthesis and *in vitro* anticancer evaluation of novel 2-pyrazoline derivatives obtained from 1,3,5-triazin-chalcones and hydrazines

LEYDI M. MORENO^a, RODRIGO ABONIA^a, JAIRO QUIROGA^a, BRAULIO INSUASTY^{a*}

^a *Departamento de Química, Universidad del Valle, Cll 13#100-00, A.A. 25360, Cali, Colombia*

e-mail leydi.moreno@correounivalle.edu.co

A new series of 2-pyrazoline derivatives **IX** were synthesized by cyclocondensation reaction of 2,4,6-tri-substituted-1,3,5-triazin-chalcones **VIII** with hydrazine hydrate and its derivatives. Chalcones **VIII** were obtained by Claisen-Schmidt condensation¹ between aromatic aldehydes **VII** and triazinic derivatives **VI**. Precursor **VI** (R_1 :a), chalcones **VIII** (R_1 :a/ R_2 :a-g) and pyrazolines **IX** (R_1 :a/ R_2 :a-g/ R_3 :a-d) were evaluated *in vitro* as anticancer agents by the National Cancer Institute (NCI). Chalcone **VIII** (R_1 :a/ R_2 :g), and pyrazolines **IX** (R_1 :a/ R_2 :d,e,g/ R_3 :a) showed remarkable activity against renal cancer (RXF 393), breast cancer (HS 578T) and leukemia (MOLT-4), with GI_{50} values ranging between 0.569 and 15, 5 μ M.



Scheme 1.

Bibliography

¹Wang, G.; Qiu, J.; Xiao, X.; Cao, A.; Zhou, F. *Bioorg. Chem.* **2018**, 76, 249–257.

Ammidi dell'acido rosmarinico come potenziali Agenti antidiabetici

VERA MUCCILLI,^A NUNZIO CARDULLO,^{A,B} GIORGIA CATINELLA,^B GIUSEPPE FLORESTA,^{A,C} SERGIO ROSSELLI,^D ANTONIO RESCIFINA,^C MAURIZIO BRUNO,^B CORRADO TRINGALI.^A

^a*Dipartimenti di Scienze Chimiche e ^c Scienze del Farmaco, Università degli Studi di Catania, Viale A. Doria 6, 95125, Catania*

^b*Dipartimenti STEBICEF e ^d SAAF, Università degli Studi di Palermo, V.le delle Scienze, 90128, Palermo*
e-mail v.muccilli@unict.it

Il diabete mellito di tipo 2 (DM2) è la condizione più comune di diabete: nei paesi industrializzati circa il 90% dei pazienti diabetici soffre di questa forma e nei prossimi decenni si prevede un notevole incremento dell'incidenza di questa malattia.¹ Oltre a determinare un incremento dei livelli di glucosio nel sangue (iperglicemia), il DM2 causa un incremento nella produzione di specie radicaliche reattive, che possono a loro volta causare danni ossidativi ai tessuti. Molecole che agiscono sia da inibitori dell' α -glucosidasi e che da antiossidanti potrebbero portare allo sviluppo di una nuova generazione di farmaci antidiabetici. I polifenoli, molecole di cui si conoscono ampiamente le proprietà antiossidanti, sono oggi oggetto di numerosi studi per l'attività ipoglicemizzante, e si prestano quindi come modelli guida. Un esempio è l'acido rosmarinico.² Sulla base di queste premesse, 10 ammidi derivate dall'acido rosmarinico sono state sintetizzate e valutate per il loro potere antiossidante e come potenziali agenti antidiabetici. Le misure di inibizione dell' α -glucosidasi mostrano che tutte le ammidi possiedono un'attività ipoglicemica più elevata rispetto sia all'acido rosmarinico che all'acarbosio, molecola commercialmente disponibile come farmaco antidiabetico. Le interazioni di queste molecole con il sito attivo dell'enzima α -glucosidasi sono state analizzate mediante uno studio di *docking* molecolare. Le 10 ammidi sono risultate anche degli ottimi agenti antiossidanti.

Bibliografia

¹ World Health Organization. Fact sheet: Diabetes. <http://www.who.int/diabetes/en/>

² Lin, L. Z.; Dong, Y.; Zhao, H. F.; Wen, L. R.; Yang, B.; Zhao, M. M. *Food Chemistry*. **2011**, 129, 884-889.

Sintesi Di Nuovi Derivati Benzoil-Aril-Pirazolonici Di Interesse Biologico

GIOVANNA PANZECA^{A§}, CARLA GENTILE^B, ANNAMARIA MARTORANA^B, FRANCESCO MINGOIA^A, ANTONINO LAURIA^B.

^a ISMN-CNR, Via Ugo la Malfa 153, 90146 Palermo

^b Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biologiche Chimiche e Farmaceutiche (STEBICEF), Università di Palermo, Italy

e-mail giovanna.panzeca@ismn.cnr.it

Recenti studi di reattività condotti su derivati 1-aril-pirazol-3-oni, sia come intermedi chiave che come molecole bioattive, hanno permesso di evidenziare alcuni aspetti di regioselectività con alcuni elettrofili, in funzione delle condizioni sperimentali utilizzate¹. A partire da tali basi, gli studi sono stati estesi alla progettazione e sintesi di nuovi derivati benzamidici variamente sostituiti incorporanti la porzione 1-aril-pirazolonica (**1**), di cui recentemente la FDA (2017) ha approvato la commercializzazione dell' EDARAVONE (**2**), un analogo strutturale, come nuovo agente neuroprotettivo. Lo scopo di questa ricerca mira a verificare gli effetti derivanti da una componente potenzialmente neuroprotettiva modulata da una componente benzamidica variamente sostituita² per l'ottenimento di nuovi derivati (**3**) di cui investigarne l'attività biologica.

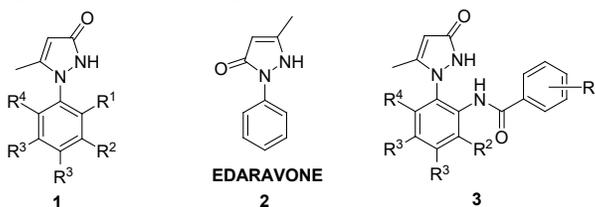


Figura 1

Un preliminare screening di vitalità cellulare permetterà di mettere in evidenza i composti a carattere citotossico, la cui l'attività biologica verrà approfondita e supportata da studi *in silico*^{2,3}.

Bibliografia

¹ Mingoia F., Panzeca G., Gentile C., Martorana A., Lauria A.; MedChemSicily2018, Palermo, 17-20 July 2018, pp159.

² Lauria A., Gentile C., Mingoia F., Palumbo Piccionello A., Bartolotta R., Delisi R., Buscemi S., Martorana A., *Chem. Biol. Drug Des.* **2018**, 91, 39.

³ Lauria A., Mingoia F., Garcia-Argaez A. N., Delisi R., Martorana A., Dalla Via L., *Chem. Biol. Drug Des.* **2018**, 91, 463.

(#) Borsista Regione Sicilia "Progetto MatISSE" Materiali Innovativi e Sostenibili per la Salute e l'Energia.

Idrogel fluorescenti per applicazioni biomediche

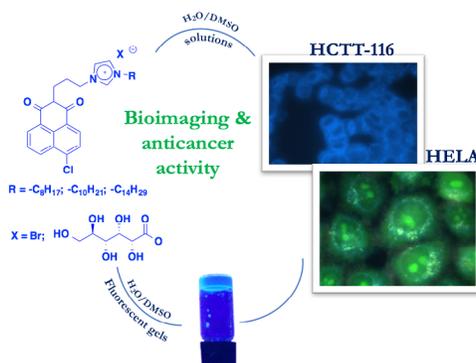
CARLA RIZZO,^A PATRIZIA CANCEMI,^B SALVATORE MARULLO,^A RENATO NOTO,^A FRANCESCA D'ANNA^A

^a Università degli Studi di Palermo, Dipartimento STEBICEF, Sezione di Chimica, Viale delle Scienze Ed. 17, 90128, Palermo

^b Università degli Studi di Palermo, Dipartimento STEBICEF, Sezione di Biologia Cellulare, Viale delle Scienze Ed. 16, 90128, Palermo
e-mail: carla.rizzo03@unipa.it

Lo studio di idrogel supramolecolari da utilizzare in ambito biomedico è in continua espansione. Questo è dovuto al fatto che, così come gli idrogel polimerici, mostrano eccellenti proprietà meccaniche, ma possono anche essere sottoposti reversibilmente a rigonfiamento o a transizioni gel-sol in risposta a stimoli esterni (temperatura, pH, enzimi, agenti redox).¹ Ad esempio, la buona risposta degli idrogel supramolecolari agli stimoli fisiologici, insieme alla loro elevata biodegradabilità e biocompatibilità, ne ha permesso l'utilizzo per la diagnosi tumorale. Solitamente, questi materiali sono facilmente assimilati dalle cellule e hanno la funzione di *carrier* per le molecole attive nel *bioimaging*.¹ Alla luce di queste premesse e della spiccata attività antimicrobica precedentemente riscontrata su idrogel formati da sali di imidazolio,² si è pensato di sintetizzare nuovi sali organici di imidazolio fluorescenti, che potessero assolvere alla duplice funzione di *gelator* e di agente per il *bioimaging*.

Sono stati ottenuti idrogel fluorescenti che hanno mostrato interessanti proprietà chimico-fisiche (temperatura di transizione gel-sol, risposta a stimoli esterni, reologia, morfologia, indagini spettrofluorimetriche) e biologiche (attività antiproliferativa, *bioimaging* su cellule tumorali in vitro e rilascio controllato del *gelator* in soluzione fisiologica).



Bibliografia

¹ Dong, R.; Pang, Y.; Su, Y.; Zhu, X. *Biomater. Sci.*, **2015**, 3, 937-954.

² Rizzo, C.; Arrigo, R.; Dintcheva, N. Tz.; Gallo, G.; Giannici, F.; Noto, R.; Sutera, A.; Vitale, P.; D'Anna, F.; *Chem. Eur. J.*, **2017**, 23, 16297 - 16311.

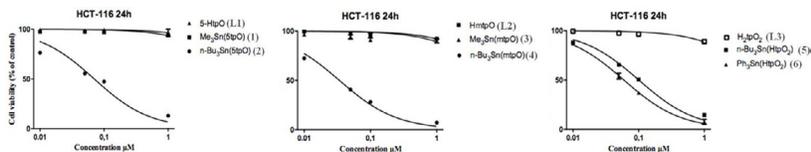
Attività citotossica di complessi organostagno(IV) con triazolopirimidine contenenti atomi di ossigeno esociclico

SIMONA RUBINO,^a ALESSANDRO ATTANZIO,^a ROSALIA BUSÀ,^a SIMONE D'A-GOSTINO,^b PIERA SABATINO,^b ANNA FRAZZITTA,^a MARIA ASSUNTA GIRASOLO,^a LUISA TESORIERE^a

^a Dipartimento di STEBICEF, Università di Palermo, Viale delle Scienze, 90128, Palermo

^b Dipartimento di Chimica G. Ciamician, Università di Bologna, Via F. Selmi 2, 40126, Bologna
e-mail simona.rubino@unipa.it

Le triazolopirimidine sono leganti eterociclici di crescente interesse. I composti di organostagno(IV) sono caratterizzati dalla presenza di un atomo di stagno (Sn) legato covalentemente ad uno o più sostituenti organici. In questo studio¹ sono stati sintetizzati: Me₃Sn(5tpO)(**1**); *n*-Bu₃Sn(5tpO)(**2**); Me₃Sn(mtpO)(**3**); *n*-Bu₃Sn(mtpO)(**4**); *n*-Bu₃Sn(HtpO₂)(**5**); Ph₃Sn(HtpO₂)(**6**) e la loro citotossicità valutata su tre differenti linee cellulari tumorali umane: HCT-116 (carcinoma del colon retto), HepG2 (epatocarcinoma) e MCF-7 (carcinoma mammario).



I complessi **2**, **4**, **5** e **6** hanno mostrato attività citotossica di 1-2 ordini di grandezza superiore al *cis*-platino, sulle 3 linee cellulari tumorali. Il meccanismo di morte cellulare è stato quindi indagato sulle cellule HCT-116, le più sensibili all'azione dei composti. Tutti hanno mostrato: a) attività proapoptotica, come evidente dall'esternalizzazione della fosfatidilserina; b) meccanismo di esecuzione intrinseco come evidente dalla caduta di potenziale mitocondriale e dall'incremento di specie reattive dell'ossigeno (ROS); c) i complessi **2** e **4** pur avendo leganti differenti causano un blocco del ciclo in fase G₀/G₁ mentre il complesso **6** blocca le cellule in fase G₂/M. Infine l'indice di selettività calcolato su cellule intestinali normal-like indica che il complesso **6** è il più specifico contro le cellule tumorali. I complessi **1** e **2** sono stati sottoposti ad uno studio strutturale mediante raggi X per correlarne la struttura all'attività biologica.

Bibliografia

¹Girasolo, M.A.; Di Salvo, C.; Schillaci, D.; Barone, G.; Silvestri, A.; Ruisi, G.; *J. Organomet. Chem.*, **2005**, 690, 4773-4783.

Novel route for the preparation of persistent nanophosphors

MARIA LUISA SALADINO^a, DMITRY KOVALENKO^b, VLADIMIR GAISHUN^b, VITALI BOIKO^c, MARTA MARKOWSKA^c, ALEKSANDRA GERUS^c, DARIUSZ HRENIAK^c

^a *STEBICEF Department, University of Palermo, Viale delle Scienze ed.17, Palermo, Italy*

^b *Francisk Skorina Gomel State University, Soviet str., 104, Gomel, Belarus*

^c *Department of Spectroscopy of Excited States, Institute of Low Temperature and Structure Research, Polish Academy of Sciences, Ul Okólna 2, Wrocław, Poland*

e-mail marialuisa.saladino@unipa.it

Persistent phosphors have recently aroused great interest and play ever more important role in many areas of materials science and new applications. In this presentation, a simple, inexpensive, and versatile route for the synthesis of nanosized yttrium aluminium gallium garnet (YAGG) co-doped with Cr³⁺, Ce³⁺ and Pr³⁺ will be presented.

The phosphors have been prepared by Urea Glass Route, dispersing the metal salts in ethanol and then adding appropriate amount of urea to form a gel-like starting material. The obtained gel-like precursor is then calcined at suitable temperature in order to obtain the garnet phase. Proposed method allows to obtain well-defined shape, not aggregated and nanometric particles (20-45 nm).

The effect of the thermal treatment on the evolution of the precursors toward the formation of garnet phase has been investigated by X-ray powder diffraction (XRD), Infrared and Raman Spectroscopy. The morphology has been investigated by Transmission Electron Microscopy (TEM). Results showed that the features of the final product, as well as the optical properties, depend on calcination temperature and that the materials show persistent luminescence.

The CPMSC project (Ref. No. 1206.007-18, Spectroscopic properties of sol-gel composite materials exhibiting persistence luminescence for the application as luminescent solar concentrators) is co-financed by the CEI Know-how Exchange Programme sponsored by the CEI Fund at the EBRD.

Discovery the paintings by using portable techniques

MARIA LUISA SALADINO^A, ROSINA C. PONTERIO^B, EUGENIO CAPONETTI^A,
FAUSTA GIACOBELLO^B, VINCENZO RENDA^B, CIRINO S. VASI^B

^a *STEBICEF Department, University of Palermo, Viale delle Scienze ed.17,
Palermo, Italy*

^b *CNR, Istituto per i Processi Chimico Fisici, Viale Ferdinando Stagno
D'Alcontres 37, I-98158 Messina, Italy
e-mail marialuisa.saladino@unipa.it*

In the last decades a growing interest was observed in the field of Archaeometry. Any analytical investigation into archaeological finds should be non-invasive due to their uniqueness, and this main demand is fully satisfied by using portable instrumentation. The information gained about the state of conservation and the nature of the constituent materials can help before and during a restoration work, and at the same time allows to confirm or disprove provenance hypothesis.

In this presentation some examples of the simultaneous application of complementary portable techniques on some famous paintings

The Polyptych of San Gregorio of Antonello da Messina (Messina)

The Trionfo della Morte of Palazzo Abatellis (Palermo)

A wall painting saved inside the church of Santa Maria delle Palate (Tusa, Me)

is reported.

Determinazione dell'acidità nei carburanti mediante un sensore ottico a base porfirinica

FABIANA VENTO^A, ANGELO NICOSIA^A, ANTONIO ABBADESSA^A, GISELLA M. DI MARI^A, PLACIDO G. MINEO^{A,B}

^a *Dipartimento di Scienze Chimiche, Università di Catania, Viale A. Doria 6, 95125, Catania*

^b *CNR-IPCF Istituto per i Processi Chimico-Fisici, Viale F. Stagno d'Alcontres 37, I-98158, Messina*
e-mail fabianav2@libero.it

La presenza di acidi organici nei carburanti, in moderate quantità, può esercitare una funzione lubrificante. Tuttavia, alte concentrazioni di acidi possono costituire un rischio per l'integrità dei sistemi di propulsione. Infatti, a causa dei processi di degradazione ossidativa, la concentrazione delle specie acide può aumentare durante lo stoccaggio dei carburanti.

Per questi motivi diventa importante il monitoraggio della concentrazione di acidi. In quest'ambito già esistono dei sensori elettrochimici di acidità progettati per condurre misure in fase acquosa, ma non adatti, a causa della loro natura non conduttiva, ai liquidi organici (come i carburanti). [1]

Al fine di superare questo problema come sensore di acidità [2] è stato impiegato un derivato porfirinico PEGilato (5,10,15,20-p-(ω -metossi polietileneossifenil)-porfirina) additivato in minime quantità (circa 3ppm).

Su questi sistemi sono state effettuate delle titolazioni spettrofotometriche in fase organica (toluene, benzina, gasolio e jet fuel).

Infine, per poter escludere il rischio di un contributo negativo dell'additivo porfirinico nella formazione di residui nocivi al sistema propulsivo, tramite termogravimetria ne è stata accertata la completa ossidazione nelle normali condizioni di combustione nei motori.

Bibliografia

¹ Widera, J.; Riehl, B. L.; Johnson, J. M.; Hansen, D. C.; *Sensor and Actuators B: Chemical*, 2008, 130, 871-881

² Mineo, P. G.; Vento, F.; Abbadessa, A.; Scamporrino, E.; Nicosia, A., *Dyes and Pigments*, 2019, 161, 147-154.

MUC1/CIN85 PPI inhibitors: binding site prediction and molecular docking studies

SERENA VITTORIO,^A ROSARIA GITTO,^A ARTHUR GARON,^B UGO PERRICONE,^C THIERRY LANGER,^B LAURA DE LUCA^A

^aDepartment CHIBIOFARAM Polo Universitario SS. Annunziata, Università di Messina, Viale Palatucci, I-98168 Messina, Italy.

^bDepartment of Pharmaceutical Chemistry, Faculty of Life Sciences, University of Vienna, Vienna, Austria.

^cDrug Design Group, Fondazione Ri.MED, via Bandiera 11, 90145 Palermo. e-mail svittorio@unime.it

MUC1 is a transmembrane glycoprotein overexpressed in most adenocarcinomas. The extracellular domain of MUC1 consists of a region of variable number of tandem repeats (VNTRs), which are rich in prolines; whereas, this region is extensively glycosylated in physiological conditions. The hypo-glycosylation of MUC-1 increases the accessibility of the backbone to new protein-protein interactions that affect the intracellular signaling of tumor cells. CIN85, an adaptor protein involved in many physiological processes, interacts with the tumor form of MUC1 through its SH3 domain, promoting the invasiveness of cancer cells¹. Herein, we reported a computational approach for the identification of inhibitors of MUC1/CIN85 protein-protein interaction. In particular, we investigated the opening of transient pockets on CIN85 SH3A domain during 400 ns of molecular dynamic (MD) simulation. By using three different approaches we detected the presence of a druggable putative ligand binding pocket (Figure 1) on the binding surface of CIN85 SH3A. Then, compounds from Asinex PPI library were docked into the identified pocket and MD simulations were performed for the best scored hits in order to evaluate the stability of the ligand-protein complexes. Finally, the compounds that showed promising results in this *in silico* screening were selected for a further biological testing in cancer cells.

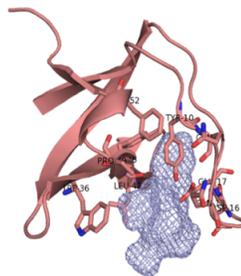


Figure 1. Putative ligand binding pocket (blue mesh) identified on CIN85 SH3 domain.

References

¹ Cascio S. et al.; *Oncotarget*, **2013**, *4*, 1686- 1697.

Lista dei partecipanti

Amico Pietro	P1	Università di Palermo
Armetta Francesco	P2, OC19	Università di Palermo
Arrabito Giuseppe Domenico	P3, OC2	Università di Palermo
Avellone Giuseppe	P42	Università di Palermo
Barattucci Anna		Università di Messina
Barone Giampaolo	P4	Università di Palermo
Barreca Marilia	OC7	Università di Palermo
Billeci Floriana	P5	Università di Palermo
Bonaccorsi Paola		Università di Messina
Bonfiglio Andrea		Novaelements
Bruno Maurizio		Università di Palermo
Buscemi Silvestre		Università di Palermo
Calabrese Carla	P6	Università di Palermo
Campofelice Ambra	P7	Università di Palermo
Cante Francesco		Shimadzu
Carbone Daniela	OC8	Università di Palermo
Cardiano Paola		Università di Messina
Cardullo Nunzio	OC6	Università di Catania
Cascioferro Stella Maria		Università di Palermo
Cataldo Salvatore	P8	Università di Palermo
Chiappara Clara	P9	Università di Palermo
Chillè Donatella	P10	Università di Messina
Chillura Martino Delia		Università di Palermo
Ciaffaglione Valeria	P11	Università di Messina
Cigala Maria Rosalia	P12	Università di Messina
Cinà Valerio	OC17	Università di Palermo
Cirrincione Girolamo	OFC	Università di Palermo
Colombo Carmelo	IL3	I.T.I.S. "E. Torricelli"-S. Agata di Militello
Cordaro Annalaura	OC16	Università di Messina

Costa Maria	P13	Università di Palermo
Cunsolo Vincenzo		Università di Catania
Daidone Giuseppe		Università di Palermo
D'Anna Francesca		Università di Palermo
Di Francesco Antonella	O4	Università di Catania
Di Stefano Vita	P14, P15	Università di Palermo
Di Vincenzo Antonella	OC14	Università di Palermo
Diana Patrizia		Università di Palermo
Fallica Antonino Nicolò	P16	Università di Catania
Fiore Tiziana	P17	Università di Palermo
Floresta Giuseppe	OC12	Università di Catania
Fontana Gianfranco		Università di Palermo
Fortuna Cosimo Gianluca		Università di Palermo
Foti Salvatore		Università di Catania
Gaeta Massimiliano	P18	Università di Catania
Gangemi Chiara	P19	Università di Catania
Giacalone Francesco		Università di Palermo
Giuffrè Ottavia		Università di Messina
Grasso Giuseppa Ida	P20	Università di Catania
Gruttaduaria Michelangelo		Università di Palermo
Gulotta Maria Rita		Università di Palermo
Ingarra Angela Maria	P21	Università di Palermo
Irto Anna	OC13	Università di Messina
La Franca Mery	P22	Università di Palermo
Lauria Antonino		Università di Palermo
Lazzara Giuseppe	P23	Università di Palermo
Leggio Antonella	PL3	Università della Calabria
Leonardi Carmen	P24	Università di Palermo
Liguori Angelo		Università della Calabria
Lo Meo Paolo	P25, P26	Università di Palermo

Maggio Antonella		Università di Palermo
Maiorana Santina	P27, P28	Università di Messina
Mancuso Aurora	P29	Università di Messina
Martorana Annamaria		Università di Palermo
Marullo Salvatore	P30	Università di Palermo
Marzullo Paola		Università di Palermo
Massaro Marina	OC1	Università di Palermo
Mauriello Francesco	PL2	Università di Reggio Calabria
Mazzaglia Antonino		CNR-ISMN sede Messina
Micale Nicola	PL4	Università di Messina
Milioto Stefana	P31	Università di Palermo
Mirabile Salvatore	P32	Università di Messina
Moreno Lopez Leydi Marcela	P33	Universidad del Valle Cali
Muccilli Vera	P34	Università di Catania
Musumarra Giuseppe		Università di Catania
Nicoli Vincenzo	IL4	Ordine Inter.le dei Chimici della Sicilia
Noto Renato		Università di Palermo
Pace Andrea		Università di Palermo
Padova Alessandro	IL1	RiMed
Palumbo Piccionello Antonio		Università di Palermo
Panzeca Giovanna	P35	CNR-ISMN sede Palermo
Parrino Barbara		Università di Palermo
Pasquinucci Lorella	OC5	Università di Catania
Patamia Vincenzo	OC15	Università di Catania
Pecoraro Camilla		Università di Palermo
Pettignano Alberto		Università di Palermo
Pibiri Ivana		Università di Palermo
Piperno Anna		Università di Messina

Pittalà Valeria		Università di Catania
Pomilla Rita Francesca	OC18	Università della Calabria
Raimondi Maria Valeria		Università di Palermo
Randazzo Ornella		Università di Palermo
Rescifina Antonio		Università di Catania
Riela Serena		Università di Palermo
Rizzo Carla	P36	Università di Palermo
Romeo Isabella	OC9	Università della Calabria
Rubino Simona	P37	Università di Palermo
Russo Marco	OC3	CNR-ISMN sede Palermo
Saladino Maria Luisa	P38, P39	Università di Palermo
Salerno Loredana		Università di Catania
Saletti Rosaria		Università di Catania
Scala Angela		Università di Messina
Scopelliti Michelangelo		Università di Palermo
Sgarlata Carmelo		Università di Catania
Spanò Virginia		Università di Palermo
Torcasio Serena Maria	OC11	Università di Messina
Toscano Marirosa		Università della Calabria
Trapani Federica		CerealDocks spa
Turnaturi Rita	OC10	Università di Catania
Vaccaro Edoardo	IL2	Mugavero Teresa SAS
Vecchio Graziella	PL1	Università di Catania
Vento Fabiana	P40	Università di Catania
Vittorio Serena	P41	Università di Messina
Zappalà Maria		Università di Messina
Zingales Roberto	OTP	Università di Palermo

Visita il nostro catalogo:



Finito di stampare nel mese di
Febbraio 2019
Presso la ditta Photograph s.r.l – Palermo
Editing e typesetting: Valentina Tusa - Edity Società
Cooperativa per conto di NDF
Progetto grafico copertina: Luminita Petac