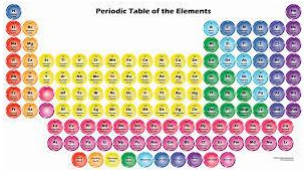
Chimica Inorganica



Prof.ssa **Dominga Rogolino**

Prof. **Mauro Carcelli**

Prof. **Matteo Tegoni**

Prof. **Luciano Marchiò**

Prof. **Giorgio Pelosi**

Prof. **Paolo Pelagatti**

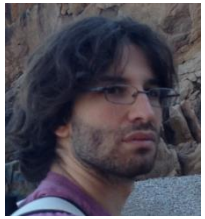
Prof. **Franco Bisceglie**

Prof.ssa **Alessia Bacchi**

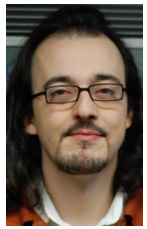
Prof.ssa **Chiara Massera**

Prof.ssa **Claudia Graiff**

Prof.ssa **Lara Righi**



Prof. **Francesco Mezzadri**



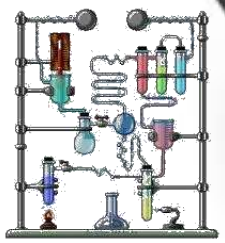
Prof. **Ludovico Cademartiri**

Dottorandi

Laureandi

Docenti e ricercatori

Personale tecnico



Network della Ricerca

- **Progetti di ricerca**
  - ✓ Internazionali (Europei, Bilaterali ecc.)
  - ✓ Nazionali
  - ✓ Locali (regionali ecc.)

- **Collaborazioni con Università italiane e straniere**
  - ✓ Tesi all'estero (Erasmus, Overworld…)

- **Collaborazioni con Enti di ricerca**
  - ✓ CNR, INFM…

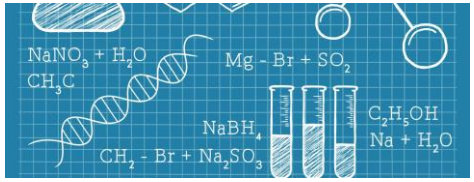
- **Collaborazioni con aziende**

- ✓ **Progettazione** dei leganti e dei complessi
- ✓ **Sintesi** (organica, metallorganica, coordinazione, stato solido, idrotermale…)
- ✓ **Caratterizzazione spettroscopica** (IR, NMR, UV, MS…)
- ✓ **Caratterizzazione strutturale** (X ray, PXRD)
- ✓ Ulteriori caratterizzazioni (CD, Fluorescenza, Microscopia elettr., an termica)
- ✓ **Studi in soluzione** (UV, CD, studi potenziometrici…)
- ✓ **Reattività** (catalisi, potere antiossidante, interazione con bioleganti, adsorbimento di molecole…)
- ✓ **Studi in collaborazione** con gruppi italiani e stranieri (progetti di ricerca)
- ✓ **Report scientifico** (tesi) e **discussione**

Composti ad attività antivirale ed antitumorale

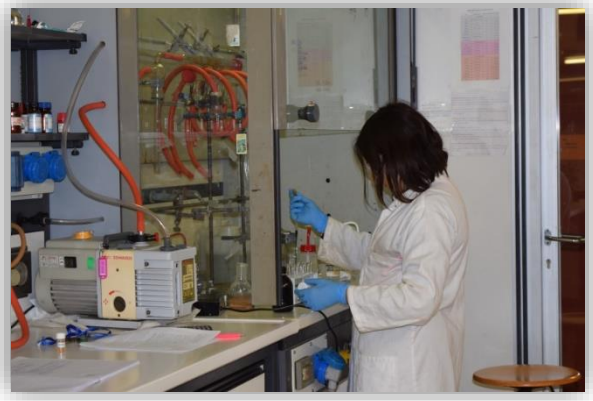
Prof. **Mauro Carcelli**
mauro.carcelli@unipr.it

Prof.ssa **Dominga Rogolino**
dominga.rogolino@unipr.it



In network con farmacologi e biologi

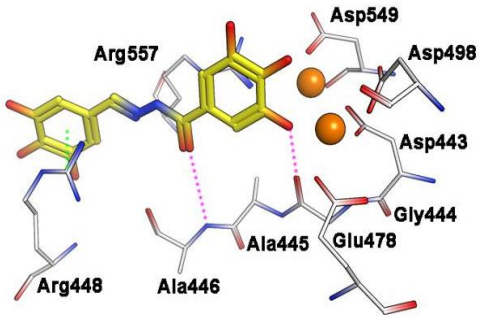
Problema chimico-farmaceutico ed approccio **bioinorganico** per affrontarlo

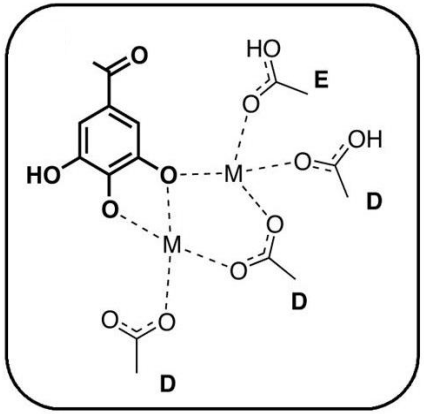


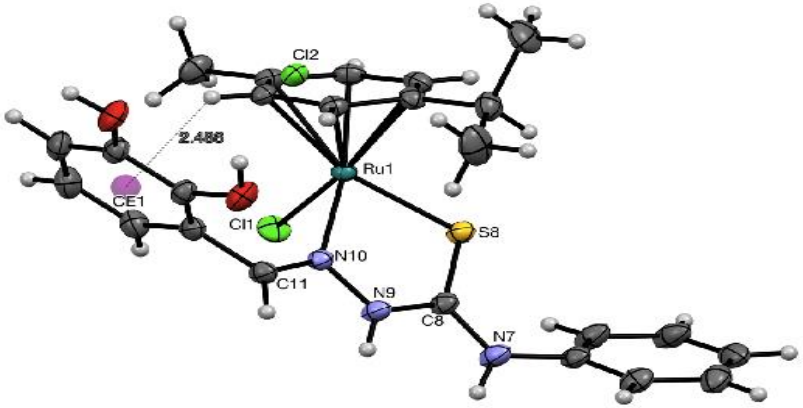
<u>In laboratorio</u>: **Sintesi** di nuovi leganti e dei relativi complessi metallici

Chelare gli ioni metallici nel sito attivo di un enzima virale, per avere nuovi composti con attività **antivirale**

Metalloenzimi:
HIV Integrasi ed RNaseH,
Influenza Virus Endonucleasi





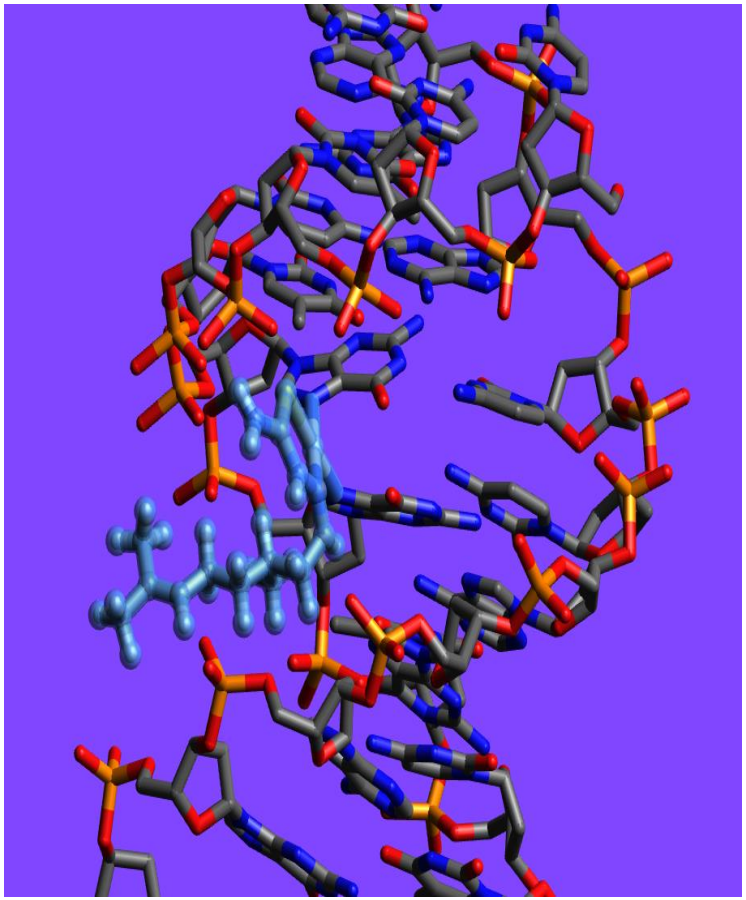


Complessi metallici ad attività antitumorale

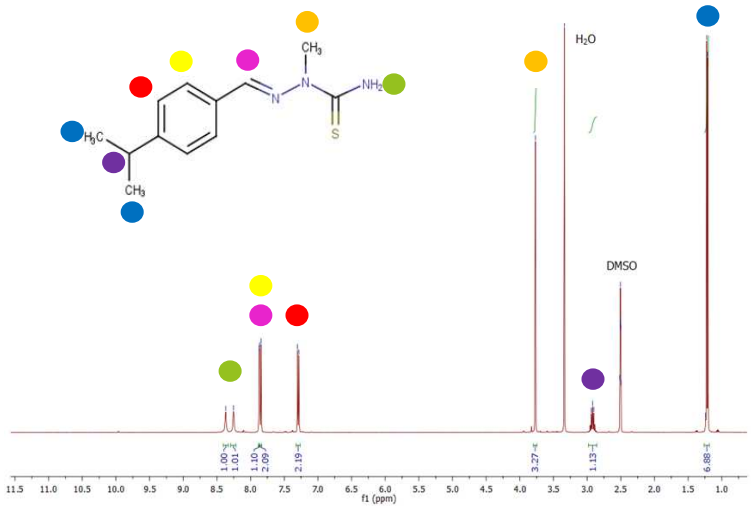
Studio di composti ad attività antitumorale

prof. Giorgio Pelosi
giorgio.pelosi@unipr.it

prof. Franco Bisceglie
franco.bisceglie@unipr.it



Cosa si fa in laboratorio:
1. sintesi di composti di coordinazione
2. caratterizzazione con tecniche spettroscopiche, XRD, CD, etc
3. valutazione dell'attività biologica in vitro

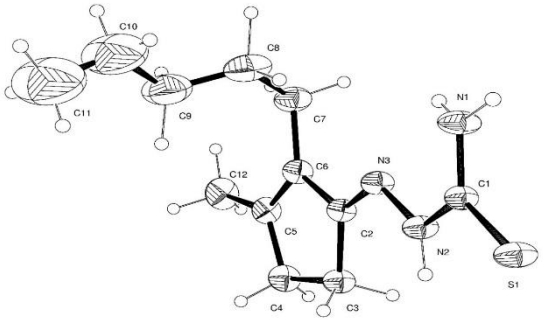


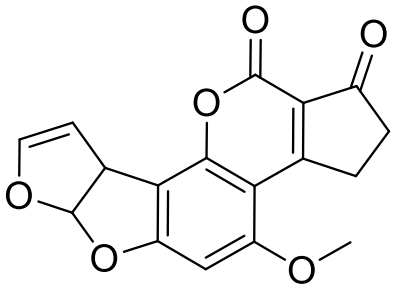
Su Facebook: Bioinorganic Chemistry - LAB83

Studio di composti ad attività antibatterica, antimicotica e antitossinogenica

prof. Franco Bisceglie
franco.bisceglie@unipr.it

prof. Giorgio Pelosi
giorgio.pelosi@unipr.it





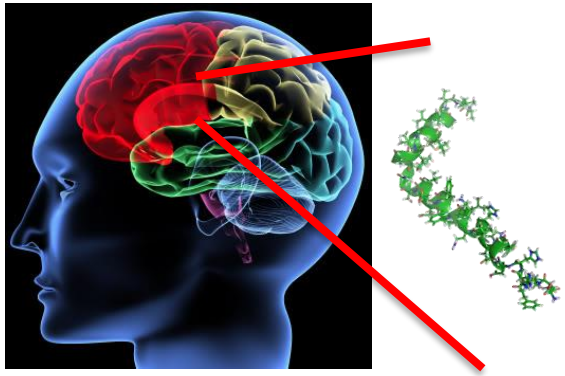
Aflatoxin B1

Cosa si fa in laboratorio:
1. sintesi di composti di coordinazione
2. caratterizzazione con tecniche spettroscopiche, XRD, CD, etc
3. valutazione dell'attività biologica in vitro

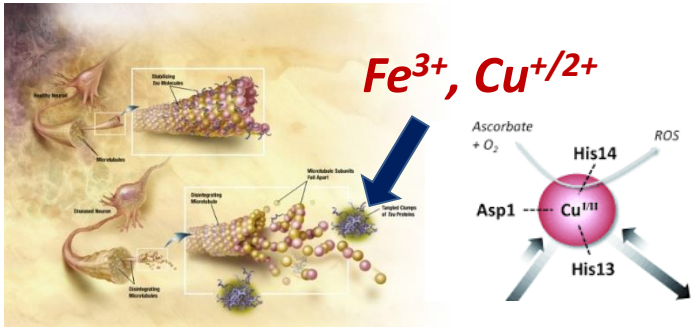
Su Facebook: Bioinorganic Chemistry - LAB83

Bioinorganica dei metallopeptidi e proteine artificiali

Matteo Tegoni
matteo.tegoni@unipr.it
tegonilab.weebly.com



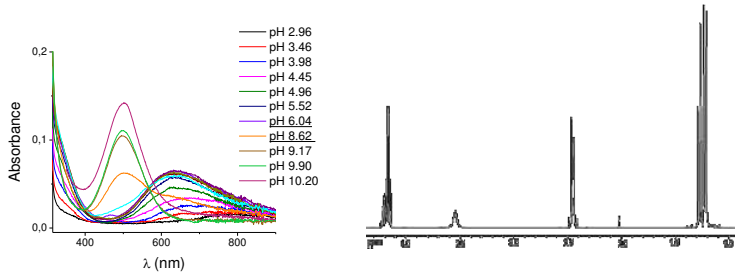
Malattie di Alzheimer e Parkinson (100 milioni di pazienti)



Stress ossidativo

Morte cellulare

Riprogettazione di metalloproteine



In laboratorio:

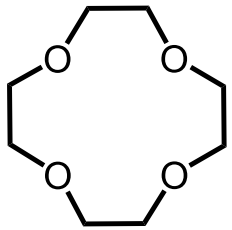
- ✓ Caratterizzazione spettroscopica
- ✓ Progettazione *in silico*
- ✓ Espressione (*biochimica*)

nature

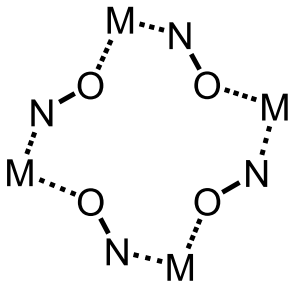
Luglio 2019

Metallacrowns – Imaging biologico

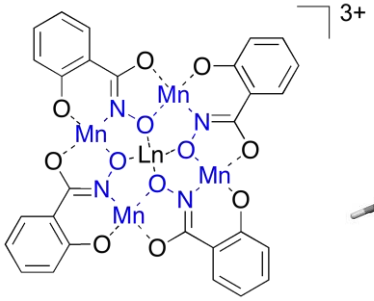
Matteo Tegoni
matteo.tegoni@unipr.it



12-C-4

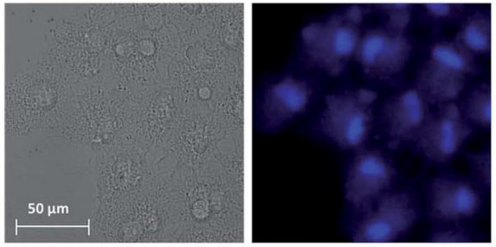


12-MC-4



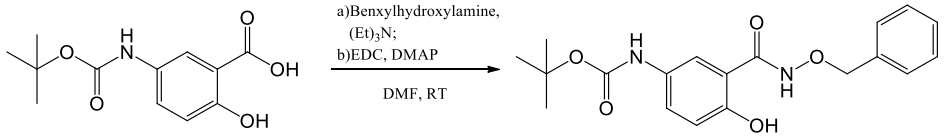
Lantanidi

Bioimaging dei tessuti



In laboratorio:

- ✓ Sintesi di leganti e complessi
- ✓ Caratterizzazione spettroscopica
- ✓ Caratterizzazione strutturale

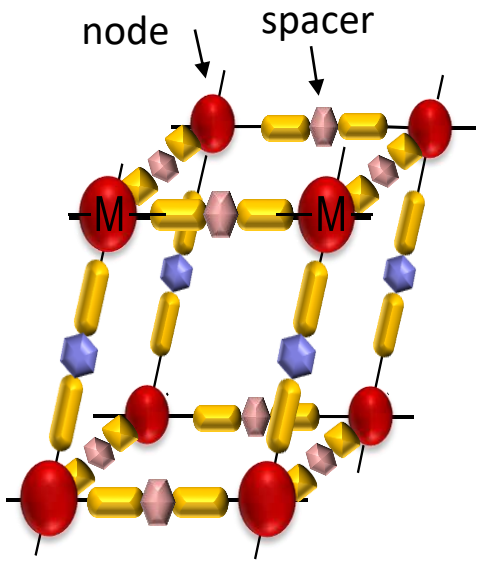


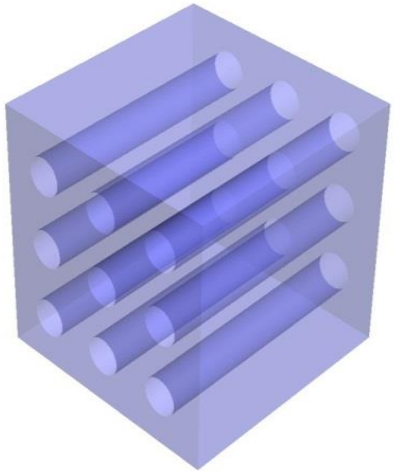
UNIPR Overworld

Coordination polymers

Prof. **Luciano Marchiò**

Structure

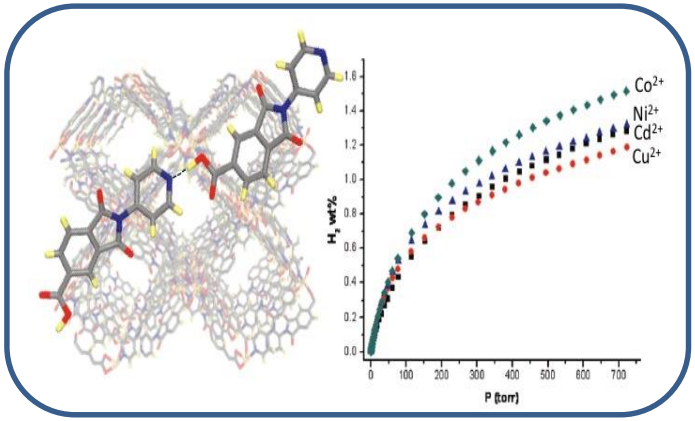


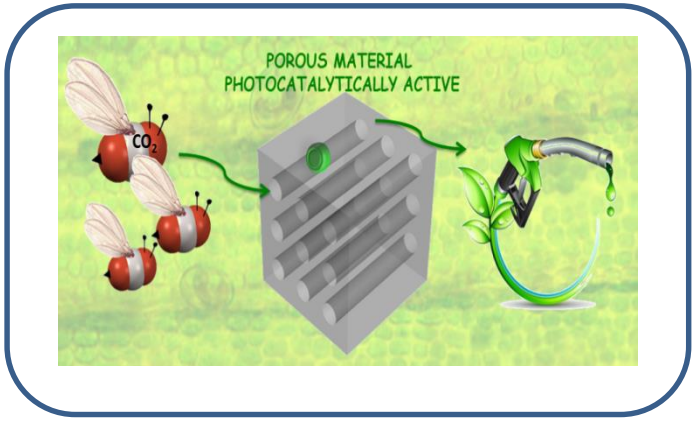


- Pore geometry
- Pore size
- Cavity properties

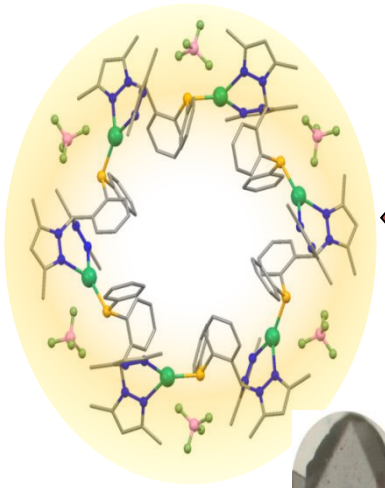
Applications: GAS STORAGE

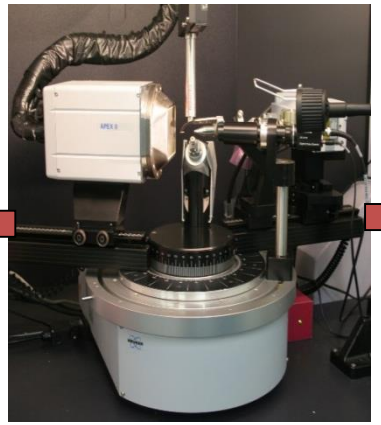
Relevance: Energy, Environmental, Catalysis



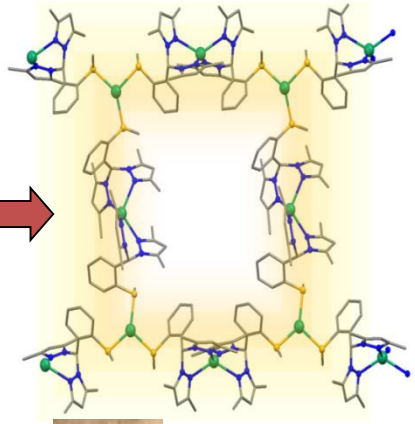


Synthesis, NMR spectroscopy, X-ray diffraction

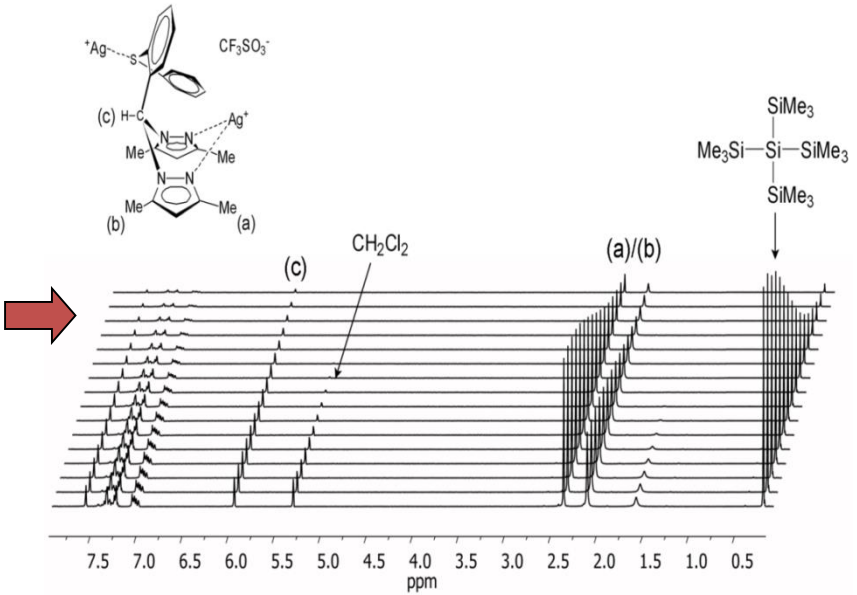




X-ray Diffraction



NMR



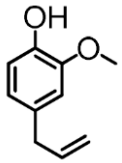
Sintesi e caratterizzazione strutturale di co-cristalli farmaceutici e nutraceutici

Prof. Alessia Bacchi e prof. Paolo Pelagatti

- ✓ Cosa = i **cocristalli** sono **materiali cristallini** ottenuti assemblando due o più componenti molecolari attraverso la progettazione di **interazioni supramolecolari**, come ad es. il legame a idrogeno. Un cocristallo ha **proprietà chimico fisiche diverse rispetto ai suoi componenti** (es. solubilità, biodisponibilità)
- ✓ Perché = nel progetto di tirocinio si progetteranno e sintetizzeranno cocristalli contenenti **ingredienti attivi in campo farmaceutico o nutrizionale** (es. eugenolo = antibatterico naturale contenuto nell'olio essenziale dei chiodi di garofano). **Questi ingredienti sono liquidi**, e verranno stabilizzati allo stato solido in forma di cocristalli.
- ✓ Come = **tecniche di sintesi allo stato solido** (cristallizzazione da soluzione e tecniche meccanochimiche); **analisi strutturale mediante diffrazione** RX da polveri e da cristallo singolo; analisi termica – DSC; data mining su banche dati cristallografiche
- ✓ Esempio:

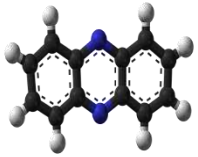
L'eugenolo è un liquido, vogliamo essere in grado di convertirlo in una forma soida, che possa rilasciare il principio attivo in modo controllato

Eugenolo

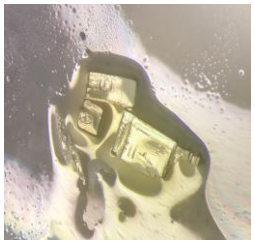


Progettazione cocristallo = Ricerca nel Cambridge Structural Database

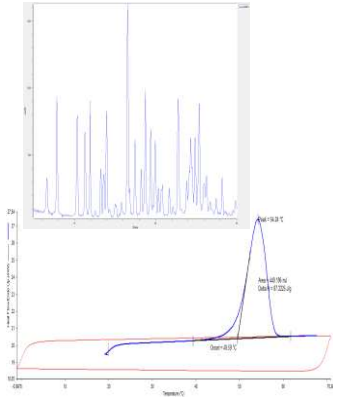
Possibile partner = fenazina

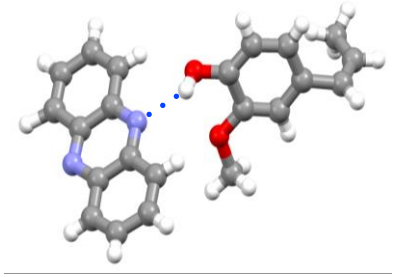


Sintesi = da soluzione e meccanochimica



Caratterizzazione cocristallo = XRD su polveri, struttura da cristallo singolo, DSC





Metal-Organic Frameworks (MOF)

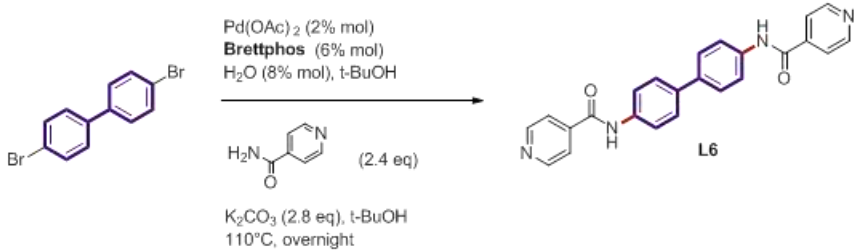
Prof. Paolo Pelagatti
Prof. Alessia Bacchi

- ✓ Materiali cristallini polimerici
- ✓ Derivano dalla combinazione di **ioni** o ***cluster*** metallici e ***linker*** **organici**
- ✓ Caratteristica principale: **elevata porosità**
- ✓ Adatti quindi ad includere differenti specie chimiche

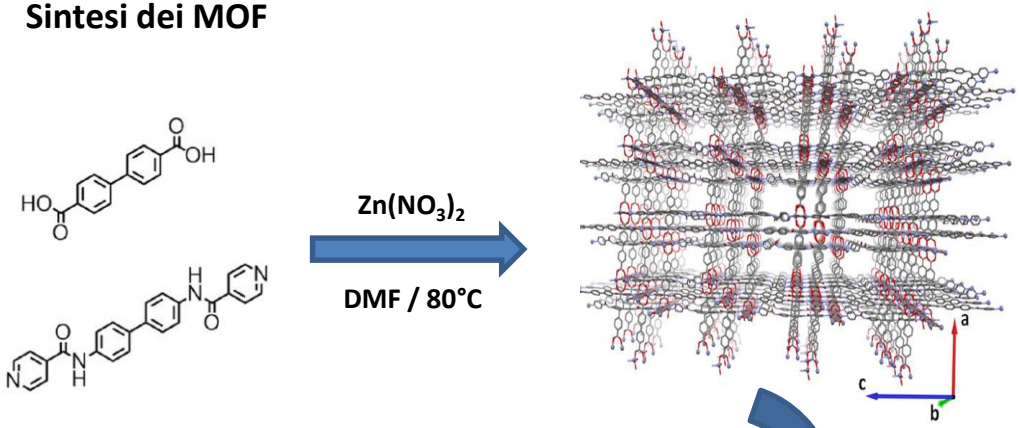
Attività sperimentale prevista:

- ✓ **Sintesi** Pd-catalizzata di *linker* organici e loro **caratterizzazione** (**IR, NMR, MS**)
- ✓ **Sintesi** solvotermale di MOFs (ottenimento di materiali cristallini eventualmente adatti ad analisi di **diffrazione di raggi X**)
- ✓ Inclusione e rilascio controllato di molecole organiche di interesse farmaceutico e/o nutraceutico

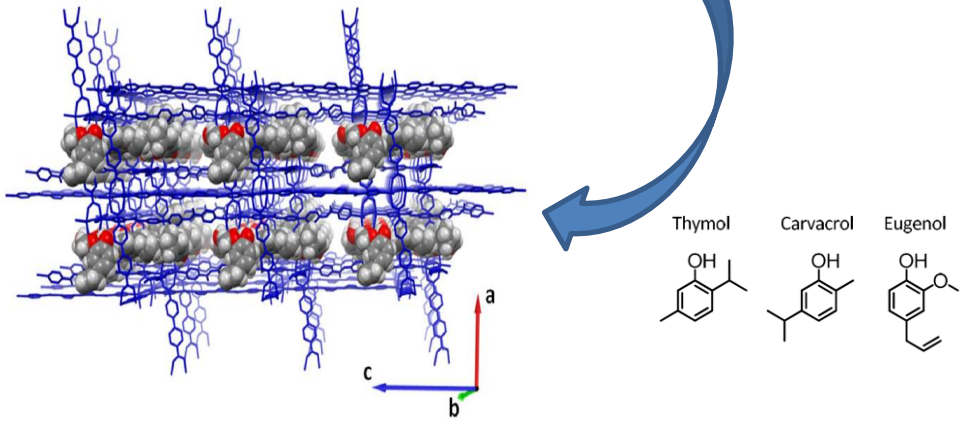
- **Sintesi Pd-catalizzata dei linker**



- **Sintesi dei MOF**

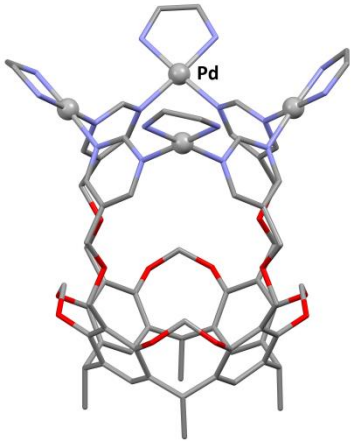


- **Inclusione/rilascio di composti nutraceutici**



Complessi metallici di cavitandi

Prof. Chiara Massera
chiara.massera@unipr.it



RICONOSCIMENTO MOLECOLARE

MOF CATALISI

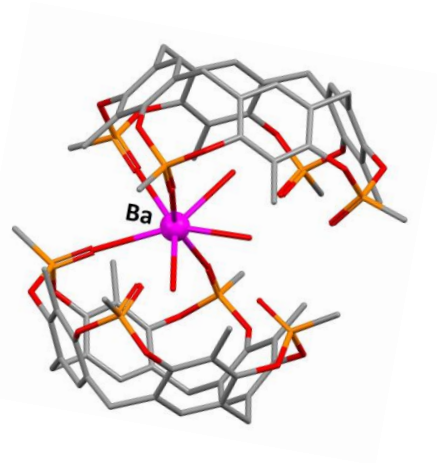
MATERIALI POROSI CAPSULE

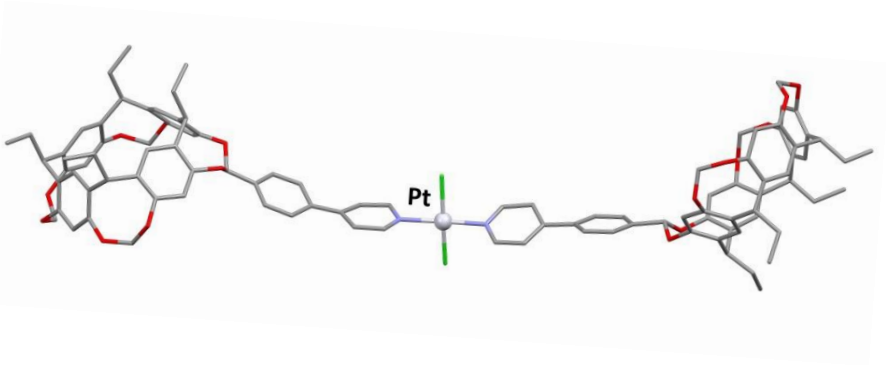
COORDINAZIONE **GABBIE**

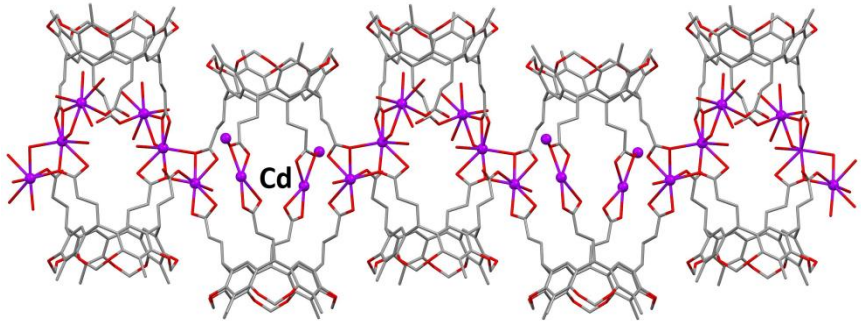
SENSING

SUPRAMOLECOLE BUILDING BLOCKS

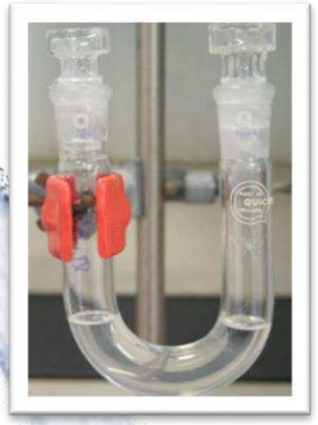
COMPLESSAZIONE







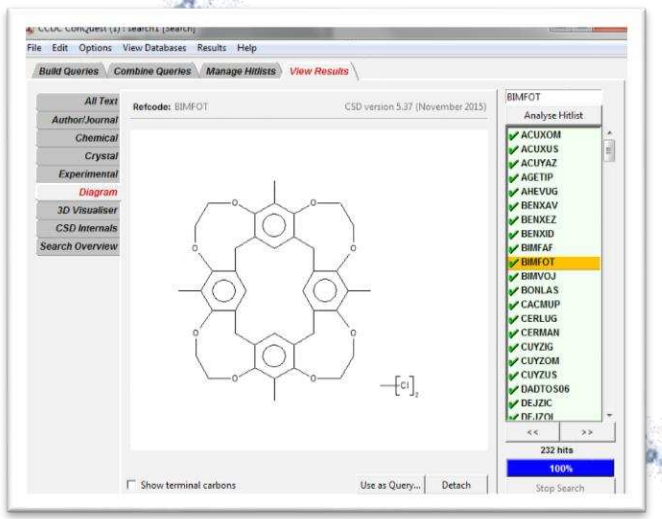
Sintesi

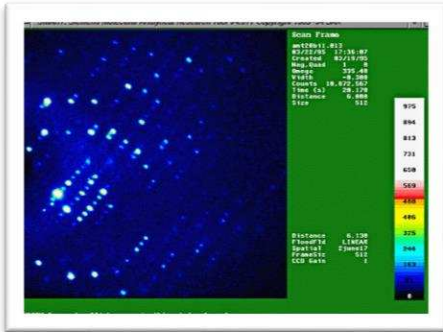


Tecniche di cristallizzazione

Software cristallografico banche dati

Risoluzione strutturale da cristallo singolo

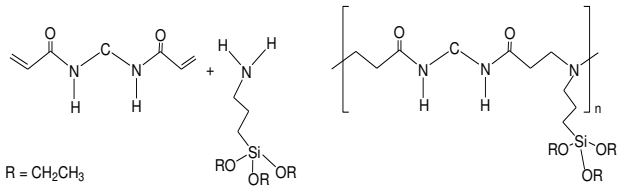




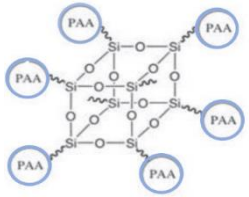
Sintesi di nanomateriali «green» per l'ambiente e i beni culturali

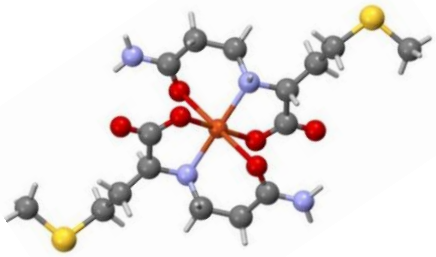
Prof.ssa Claudia Graiff

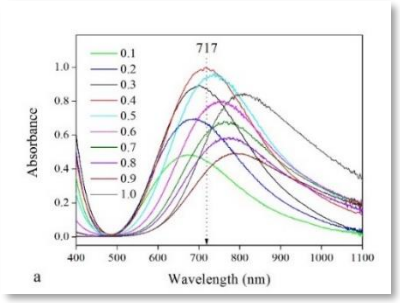
Poliammidoammine (PAA)



Michael addition

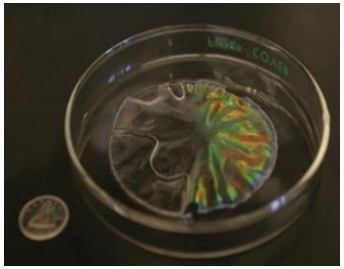




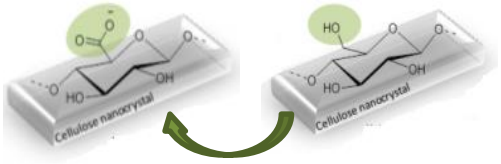


Caratterizzazione FTIR, Raman, PXRD, ESI-MS, NMR, SS-NMR

Cellulosa nanocristallina (CNC)



- Rinforzante carta e legno
- Schermo UV
- Adsorbente molecole organiche e cationi metallici
- Packaging

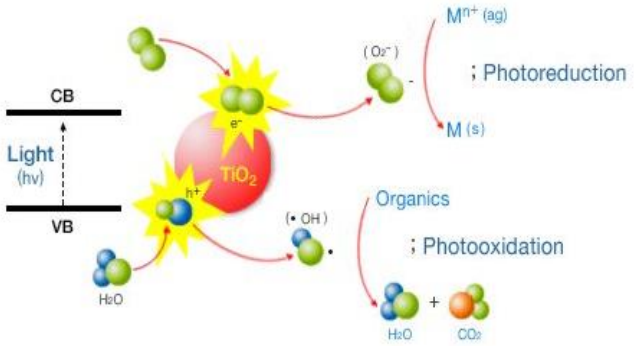


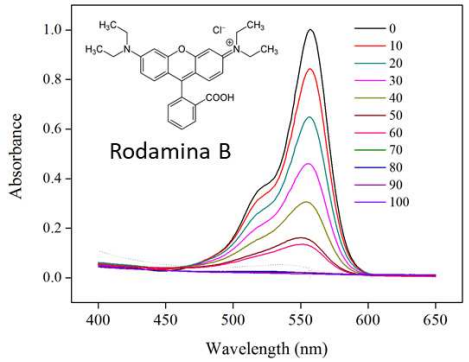
Funzionalizzazione chimica

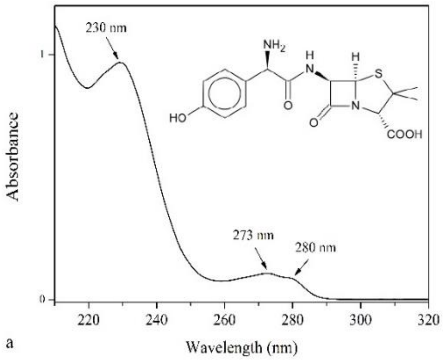
Sintesi di nanomateriali «green» per l'ambiente e i beni culturali

Prof.ssa Claudia Graiff

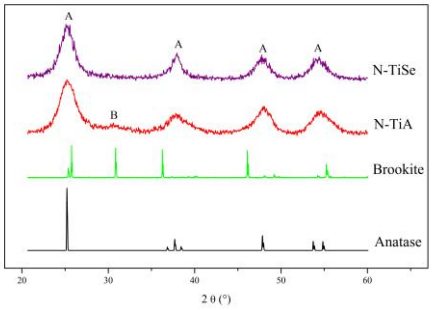
Processi di ossidazione avanzata (AOPs): fotocatalisi mediante TiO_2

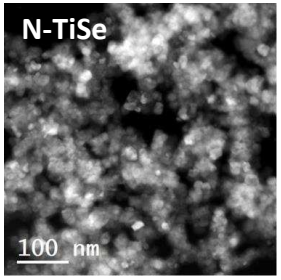






SOL di TiO_2





Studio del supporto per TiO_2

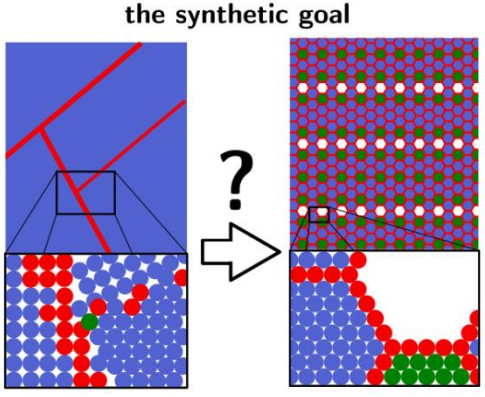
Palline di silice

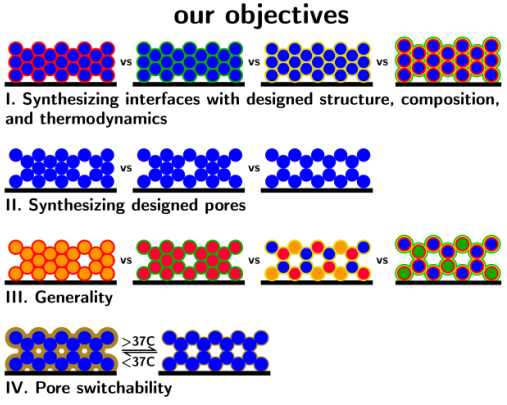
CNC

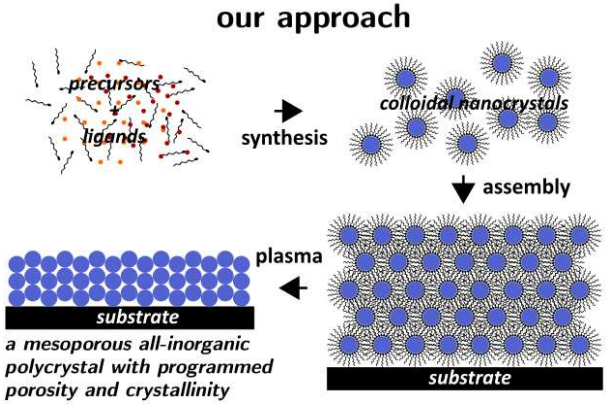
Nanomateriali con interfaccia programmata

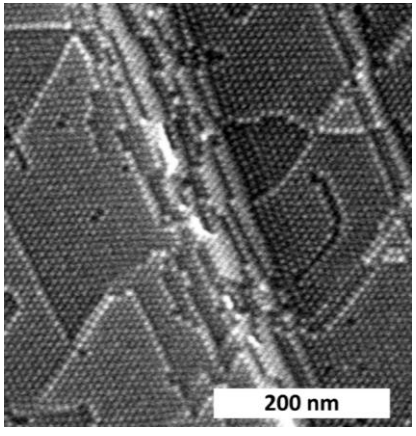
- Materiali aventi preorganizzazione gerarchica

Prof. Ludovico Cademartiri





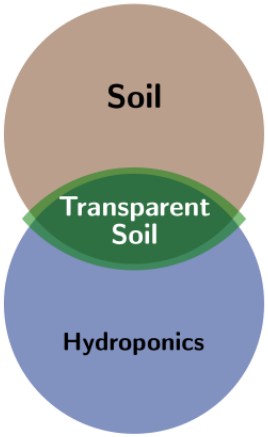


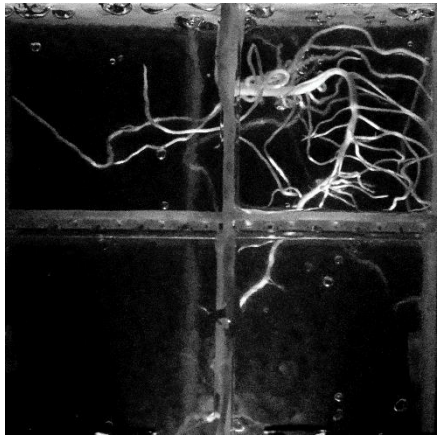


Terreni di coltura artificiali

Prof. Ludovico Cademartiri

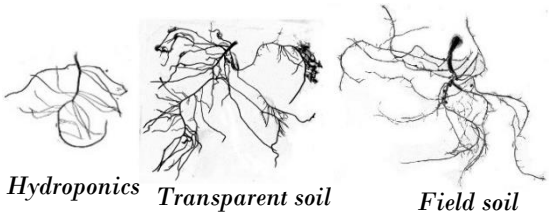
- Realizzare un materiale in grado di mimare aerazione, idratazione e trasporto di nutirenti nel suolo
- Studio dei processi di crescita delle radici delle piante





- Approccio sol-gel
  - ✓ Materiali noti e facilmente funzionalizzabili
- Caratterizzazione dei materiali: trasparenza, porosità, proprietà meccaniche

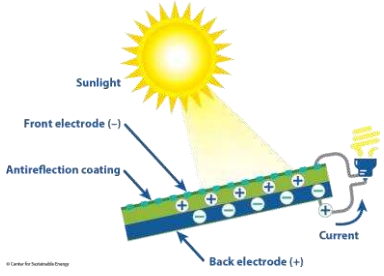
- Fenotipizzazione delle radici (studio di crescita e morfologico)

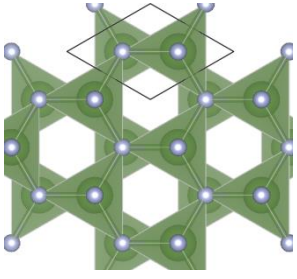


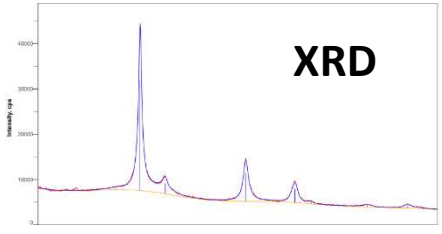
Sintesi meccano-chimica di materiali per applicazioni nel settore fotovoltaico

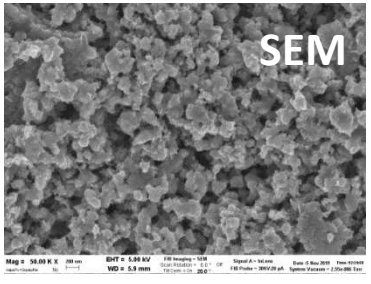
- Effetto fotovoltaico: la frontiera della «green energy»
- $In_xGa_{1-x}N$: materiale fotovoltaico di terza generazione
- Meccanosintesi: tecnica semplice, a basso costo e basso impatto ambientale

Francesco Mezzadri
francesco.mezzadri@unipr.it







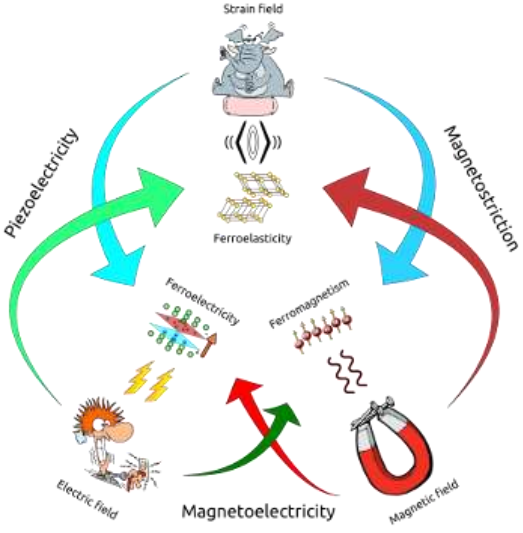


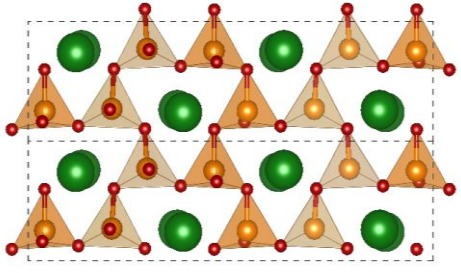
Attività di laboratorio:
- sintesi per via «meccanica» di $In_xGa_{1-x}N$
- analisi dei risultati tramite diffrazione di raggi X e microscopia elettronica (SEM) al fine di determinare le fasi presenti nei prodotti di reazione, cristallinità e composizione
- test fotovoltaici dei campioni ottenuti

Sintesi e caratterizzazione strutturale di materiali multiferroici

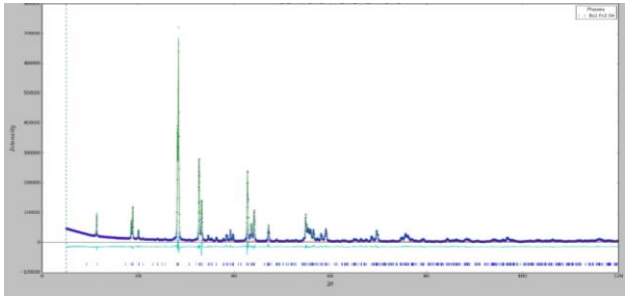
- Multiferroismo: coesistenza di ferroelettricità e magnetismo
- $BaFe_2O_4$: materiali multiferroici a struttura simile

Francesco Mezzadri
francesco.mezzadri@unipr.it





XRD



Attività di laboratorio:
- sintesi a stato solido di vari materiali della serie $BaFe_{2-x}M_xO_4$
- studio dei prodotti di reazione tramite diffrazione di raggi X da polveri e cristallo singolo
- caratterizzazioni fisiche (elettriche, magnetiche)

Chimica dei materiali cristallini

Prof.ssa Lara Righi

1) **Analisi qualitativa e quantitativa mediante diffrazione da raggi X di polveri di campioni di idrossiapatite per applicazioni biomediche**

Il progetto ha come obiettivo la creazione di una competenza nel campo della certificazione del grado di purezza e della determinazione del rapporto Ca/P di campioni standard di idrossiapatite non pura seguendo protocolli certificati ISO. Il periodo di tirocinio sarà volto alla formulazione di campioni standardizzati e all'applicazione di tecniche di diffrazione per materiali policristallini. Inoltre l'attività sperimentale sarà rivolta alla trattazione dei dati e all'uso di strumenti di calcolo per le analisi quantitative

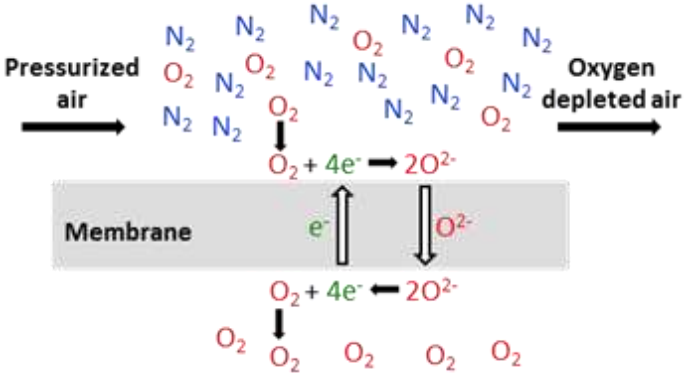
2) **Sintesi di composti ceramici con struttura perovskitica**

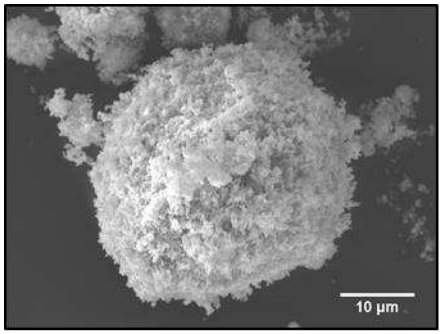
Il progetto formativo prevede l'esplorazione di tecniche di sintesi tradizionali per materiali ceramici. In particolare si esploreranno diversificate strategie di sintesi mediante l'utilizzo di precursori o di pretrattamenti per l'ottimizzazione dei processi di crescita allo stato solido mediante trattamenti termici ad alte temperature. I composti sintetizzati verranno caratterizzati mediante diffrattometria da raggi X.

Realizzazione di membrane ceramiche per la separazione di ossigeno

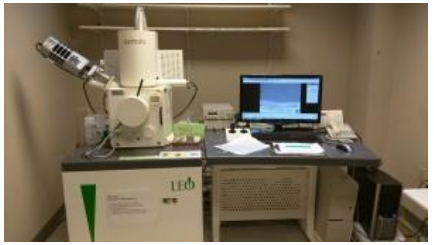
RSE Ricerca Sistema Energetico

Sede di Piacenza





- Membrane a base di ossidi misti
- Depositate su materiali porosi (attivazione termica)
- Produzione di ossigeno ad elevata purezza.



In laboratorio:

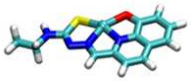
- Preparazione e caratterizzazione dell'ossido misto
- Studio delle proprietà strutturali
- Valutazione delle capacità operative della membrana
- Analisi XRD, SEM, TGA, viscosimetria.

Contatto: Prof. Paolo Pelagatti o Prof. Enrico Cavalli

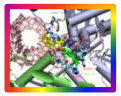
Dopo la domanda di ammissione al tirocinio?

- Domanda per area di preferenza (Inorganica, Organica…)
- I temi di ricerca qui presentati sono *indicativamente* tutti disponibili
  - ✓ (Informazioni presso i docenti)
- Convocazione da parte del delegato Area Inorganica in Comm. Didattica (prof. Marchiò)
- Presentazione posti disponibili e relative progetto formativo
- <u>I candidati presentano la loro preferenza per il tema di tirocinio</u>

Chimica Bioinorganica



Agenti chelanti ad attività antivirale

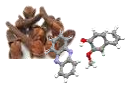


Studio di composti ad attività antitumorale

Bioinorganica di metallopeptidi e proteine artificiali

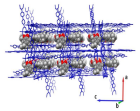
Sviluppo di composti antifungini e anti-aflatossine

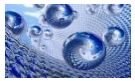
Strutturistica e Chimica dei Materiali

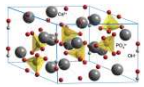
Co-cristalli farmaceutici e nutraceutici 

Complessi metallici di cavitandi

Polimeri di coordinazione

Metal-organic Frameworks (MOF) 

Sintesi di nanomateriali *green* per l'ambiente e i beni culturali 

Chimica dei materiali cristallini 

Nanochimica di materiali funzionali