

# Verbale del Collegio dei docenti del DRS Chimiche del 16/12/09

Il collegio si riunisce il 16/12/09 alle ore 12:30 nell'aula 37 del plesso didattico con il seguente ordine del giorno:

1. Comunicazioni
2. Approvazione Verbale
3. Ammissione senza esame di stranieri
4. Giudizi di ammissione all'esame finale
5. Corsi attivati per il prossimo triennio
6. Varie ed eventuali

Nella tabella seguente sono indicati con "p" i presenti con "g" gli assenti giustificati.

Baglioni Piero	G
Bardi Ugo	p
Ivano Bertini	g
Antonio Bianchi	p
Alberto Brandi	p
Andrea Caneschi	g
Gianni Cardini	p
Massimo Di Vaira	
Isabella Caterina Felli	p
Piero Frediani	p
Antonio Guarna	p
Luciano Lepri	p
PierAndrea Lo Nostro	p
Giovanna Marrazza	p
Marco Mascini	p
Pier Remigio Salvi	p
Giulietta Smulevich	g
Vincenzo Schettino	g
Andrea Scozzafava	

## Comunicazioni

Alla riunione del collegio della scuola ha partecipato al mio posto il Prof. Caneschi.

E' stato confermato il Prof. Cuccoli come direttore.

E' emersa la necessità di trovare forme di finanziamento per avere ulteriori borse in particolare è stato proposto di contattare confindustria e regione

## **Approvazione Verbali**

Si mette in approvazione il verbale del 24 Novembre 2009

approvato all'unanimità

## **Pratiche Studenti**

### **Ammissione senza esame di stranieri**

La Dr. Moreno Marrodan Maria Carmen ha chiesto l'ammissione in soprannumero in quanto titolare di una borsa Marie Curie. La Dr. Marrodan si è laureata presso l'università di La Rioja (Spagna).

Si mette in approvazione quanto segue:

Il collegio esaminata la documentazione delibera che il titolo in possesso della Dr. Marrodan è equipollente alla laurea specialistica in Chimica (classe 62/S) (DM 509/99) ai soli fini dell'ammissione al dottorato di ricerca. Il collegio delibera l'ammissione al Dottorato di ricerche in scienze Chimiche esonerandola dal sostenere la prova di ammissione.

approvato all'unanimità

Il Dr. Balachandran Yadu ha chiesto l'ammissione al dottorato di ricerca ai sensi dell'art.2 comma 4 del bando in quanto titolare di una borsa conferita dal Ministero degli affari esteri. Il dr. Balachandran allega un certificato provvisorio del "master of science in biotecnologie animali " e l'elenco degli esami sostenuti.

Si mette in approvazione quanto segue

I titoli presentati dal Dr. Balachandran corrispondono ai soli fini dell'ammissione al corso di dottorato ad una laurea specialistica in biotecnologie mediche, veterinarie e farmaceutiche (classe 9/S) (DM 509/99) ai soli fini dell'ammissione al dottorato di ricerca. Il collegio delibera l'ammissione al Dottorato di ricerche in scienze Chimiche esonerandolo dal sostenere la prova di ammissione.

approvato all'unanimità

### **Pratiche Varie appena arrivate**

Il Prof. Mordini ci chiede di approvare per il Dottorato di Ricerca di Assunta Massaro,

l'inserimento di un co-tutore visto che buona parte della tesi della Massaro e' svolta in collaborazione con GSK e un anno di attivita' viene svolto presso i loro laboratori di Verona.

Si mette in approvazione l'inserimento come co-tutore del Dr. Daniele Andreotti

approvato all'unanimità

Gianna Reginato chiede di approvare la cotutela per il Dottorato di Bernardo Pezzati che svolgerà il suo lavoro di ricerca in collaborazione con l'università di Ginevra (responsabile scientifico Alexandre Alexakis). La convenzione di cotutela è stata approntata in accordo tra l'Università di Firenze e quella di Ginevra.

approvato all'unanimità

Il Dottorando Nicoletti Francesco Paolo chiede il riconoscimento di 3 CFU per aver frequentato la V scuola GIRSE di spettroscopia EPR, tenutasi a Firenze dal 23 al 30 Settembre.

Si mette in approvazione 3 CFU per il SSD CHIM/02

approvato all'unanimità

La dottoranda Daniela Lalli chiede il riconoscimento di 3CFU per aver frequentato la scuola FEBS "Chemistry of metals in Biological systems", 14-21 Settembre in Belgio.

Si mette in approvazione 3 CFU per il SSD CHIM/03

approvato all'unanimità

## **Giudizi di ammissione all'esame finale**

Vi ho inviato una bozza del verbale da allegare, dopo approvazione, al presente verbale.

Si apre una discussione.

Viene messo in approvazione l'allegato "Giudizi di ammissione all'esame finale"

## **Corsi attivati per il prossimo triennio**

Vi ho inviato per E-mail l'elenco dei corsi, il I anno mi pare che abbia un'offerta adeguata mentre gli altri 2 sono ancora scarsi.

Su richiesta del Dr. Lo Nostro vengono scambiati nella programmazione i corsi di Chimica Fisica Ambientale e Forze Intermolecolari.

Si mette in approvazione l'attivazione dei corsi per il prossimo anno e di richiede ulteriori corsi per i 2 anni successivi.

approvato all'unanimità

## **Varie ed eventuali**

Nessuna

# Allegato: Giudizi di ammissione all'esame finale: XXII ciclo

## 1. BAROZZINO CONSIGLIO Gabriella

Titolo Tesi: Organometallics in regio- and enantio-selective synthesis: structures and reactivity

Tutore: Dr. Alessandro Mordini

a) presenta 1 lavoro inviato per la stampa;

b) 3 comunicazioni a congressi

c) ha seguito un numero sufficiente di seminari e 2 corsi (36+15 ore) a Rouen dove ha trascorso un periodo di stage dal 01/05/2008 al 31/07/2009.

e) La commissione ha ricevuto la seguente relazione dal tutore:

*La dottoranda Gabriella Barozzino Consiglio ha svolto la sua attività di ricerca per il terzo anno di Dottorato in buona parte (fino a luglio 2009) presso l'Institut de Recherche en Chimie Organique (IRCOF) di Rouen (Francia) nel gruppo del Dr. Jacques Maddaluno.*

*Durante questo periodo la Dott.ssa Barozzino ha continuato le ricerche iniziate nel 2008 sull'uso di litio ammidi chirali nell'isomerizzazione enantioselettiva di epossidi ed aziridine coniugando con l'attività di cui si era occupata precedentemente a Firenze (studi sulle isomerizzazioni di piccoli anelli eterociclici) con quella oggetto di ricerca nel gruppo di Rouen (nuove ammine chirali come leganti o come basi in sintesi asimmetrica). Inoltre la Dott.ssa Barozzino ha sviluppato un nuovo tema di ricerca basato sullo studio della struttura e sulle applicazioni sintetiche di litio fosfidi.*

*La dott.ssa Barozzino ha conseguito risultati interessanti in entrambi i campi verificando per la prima volta che le ammine chirali studiate nel gruppo di Rouen possono essere utilizzate in reazioni di isomerizzazione indotte da basi oltreché nelle reazioni di addizione nucleofila studiate finora e riuscendo a chiarire aspetti strutturali importanti delle litio fosfidi.*

*Il lavoro svolto a Rouen è in corso di elaborazione per la preparazione di due pubblicazioni scientifiche. In aggiunta anche il lavoro svolto a Firenze e' in corso di stampa sia a livello di pubblicazione sperimentale che di articolo review che riassume i risultati conseguiti finora nel settore. Il lavoro è stato condotto con impegno, autonomia e capacità propositiva e la candidata ha mostrato di sapersi ben integrare nel gruppo francese dove ha svolto la sua attività. Pertanto consiglio l'ammissione della candidata all'esame finale.*

Pertanto il dottorando

è ammesso alla Prova Finale con ampia soddisfazione del Collegio dei Docenti

## 2. **BERTI Francesca**

Titolo Tesi: New micro- and nano-technologies for biosensor development

Tutore: Prof. Giovanna Marrazza

Cotutore: Prof. Anthony P. F. Turner

a) presenta 4 lavori pubblicati, 1 in stampa e 1 inviato;

b) ha partecipato a 26 congressi e scuole;

c) ha seguito un numero sufficiente di seminari;

d) ha seguito i 4 corsi organizzati dal CD e ha partecipato al test di valutazione superandolo con 13/20.

e) La commissione ha ricevuto la seguente relazione dal tutore:

*La Dr.essa Francesca Berti ha terminato il III anno del Dottorato XXII Ciclo con una tesi dal titolo New micro- and nano-technologies for biosensor development.*

*Questa tesi stata realizzata in collaborazione con l'Università di Cranfield (UK), dove la dottoranda ha trascorso parte del suo periodo di studio.*

*La Dottoranda ha lavorato con impegno costante nei 3 anni di dottorato al suo progetto di ricerca. Inoltre, ha manifestato idee ed iniziative personali, sviluppando un ottimo spirito critico e capacità di lavoro indipendente nel suo lavoro di tesi.*

*In particolare, durante il periodo di tesi, ha ottenuto ottimi risultati per la realizzazione di (bio)sensori utilizzando nuovi micro- e nano-materiali.*

*Esprimo, quindi, un parere estremamente favorevole per la Dott.ssa Berti proponendone l'ammissione all'esame finale di Dottorato.*

Pertanto il dottorando

è ammesso alla Prova Finale con ampia soddisfazione del Collegio dei Docenti

## 3. **BIAGINI Silvia**

Titolo Tesi: Studio dell'interazione di metallo-recettori con substrati biologici.

Tutore: Prof. Antonio Bianchi

a) presenta 7 lavori pubblicati, 1 inviata;

b) 6 partecipazioni a congressi e 3 scuole;

c) ha seguito un numero sufficiente di seminari e i 4 corsi organizzati dal CD.

d) ha seguito i 4 corsi organizzati dal CD e ha partecipato al test di valutazione relativo superandolo con 16/20.

d) La commissione ha ricevuto la seguente relazione dal tutore:

*La Dott.ssa Silvia Biagini ha realizzato il lavoro di tesi di dottorato in Scienze Chimica (XXII ciclo) dedicandosi alla sintesi di metallo-recettori contenenti molecole aromatiche o eteroaromatiche estese e allo studio delle interazioni di questi con substrati biologici quali DNA, ATP, CTP, TTP, GTP, UpU e sequenze contenenti UpU. In questo lavoro, ha dimostrato come la sinergia fra i vari componenti dei metallo-recettori determini le caratteristiche di interazione e la selettività nei confronti di questi substrati. In tal senso, sono di particolare interesse alcuni complessi di Ru(II), contenenti una unità macrociclica coordinante oltre a gruppi bipyridile e dipirido[3,2-a:2',3'-c]fenazina, che hanno evidenziato una marcata variabilità nei modi di interazione con DNA dipendente dai sostituenti. Altri risultati salienti sono stati ottenuti con un complesso di Pt(II) contenente una funzionalità proflavinica separata dal centro metallico che ha mostrato una reattività con DNA paragonabile a quella di farmaci antitumorali contenenti Pt(II). In altri casi l'interazione dei substrati produce modificazioni delle proprietà di assorbimento UV-vis e di emissione di fluorescenza dei recettori che, di conseguenza, si comportano da chemosensori per i substrati. A tale riguardo, la Dott.ssa Biagini ha ricevuto il premio "Fernando Pulitori" per la migliore pubblicazione presentata da giovani ricercatori al congresso XX Italian-Spanish Congress on Thermodynamics of Metal Complexes (Pisa, giugno 20 09) con il lavoro "Polyamine receptors containing dipyridine or phenanthroline units: clues for the design of fluorescent chemosensors for metal ions" pubblicato in Chem. Eur. J., 2009, 15, 8049-8063.*

*La Dott.ssa Biagini ha dimostrato di saper lavorare con competenza ed autonomia.*

Pertanto il dottorando

è ammesso alla Prova Finale con ampia soddisfazione del Collegio dei Docenti

#### 4. **CARGANICO Stefano**

Titolo Tesi: "Synthetic modified peptides to reproduce post-translational modifications and structures of pathologically relevant proteins"

Tutore: Prof. Anna Maria Papini

a) presenta 1 lavoro pubblicato, 1 articolo e 3 capitoli di libro in preparazione

CONTROLLARE

b) 2 congressi;

c) ha seguito un numero sufficiente di seminari;

d) ha seguito i 4 corsi organizzati dal CD e ha partecipato al test di valutazione relativo superandolo con 16/20.

e) La commissione ha ricevuto la seguente relazione dal tutore:

*Il progetto di ricerca svolto da Stefano Carganico, dottorando in scienze chimiche del XXII ciclo, si colloca nell'ambito di una collaborazione internazionale fra il Laboratorio Interdipartimentale di Chimica e Biologia di Peptidi e Proteine (PeptLab) del Dipartimento*

di Chimica Organica dell'Università di Firenze e il Laboratory for Translational Research dell'Harvard Medical School (HMS) di Boston, diretto dal Prof. Michael Chorev, presso il quale il dottorando ha trascorso un periodo di un anno (settembre 2007-settembre 2008). Il dottorando si è occupato dello sviluppo di peptidi sintetici portanti modificazioni post-traduzionali (PTMs) aberranti, nonché di peptidi mimetici di strutture secondarie di proteine patologicamente rilevanti.

Nella prima parte del lavoro la PTM considerata è stata la glicazione, una reazione non enzimatica che avviene tra zuccheri aldosi e gruppi amminici liberi di proteine (funzione amminica N-terminale o catena laterale di Lys). Poiché è ormai accettato che si tratta di una delle PTM aberranti coinvolte nel meccanismo molecolare del diabete mellito, l'obiettivo finale dello studio è la messa a punto di un test diagnostico-prognostico per tale patologia. Presso l'HMS è stata osservata una correlazione tra la glicazione, l'inattivazione della proteina CD59 e l'insorgenza di complicanze vascolari nel diabete. Il dottorando ha inizialmente messo a punto la sintesi di un derivato glicato sulla catena laterale della Lisina protetto ortogonalmente per la sintesi di peptidi su fase solida, allo scopo di introdurre glicazioni in posizioni specifiche di qualsiasi sequenza peptidica. Questa strategia sintetica ha portato ad una pubblicazione sul Journal of Peptide Science. Inoltre, il building block glicato è stato introdotto in una collezione di sequenze peptidiche sulla base dell'approccio chimico inverso messo a punto presso PeptLab (PNAS 2005) con lo scopo di caratterizzare famiglie di autoanticorpi a scopo prognostico (sono in corso di deposito domande di brevetti). In particolare :

1) sono stati sintetizzati antigeni peptidici per l'ottenimento di anticorpi monoclonali anti-CD59 glicato specifici che si sono rivelati efficaci nel riconoscimento di tessuti bioptici di pazienti diabetici;

2) sono state sintetizzate sonde antigeniche peptidiche, successivamente impiegate con successo per il riconoscimento di autoanticorpi nei sieri di pazienti diabetici di tipo I e II tramite saggi ELISA;

Inoltre il building block glicato è stato utilizzato come analita in analisi UPLC di sieri di pazienti diabetici per l'identificazione di metaboliti glicati di origine amminoacidica e/o peptidica quali metaboliti.

Infine il dottorando si è occupato della sintesi totale della proteina CD59(1-77) tramite Native Chemical Ligation per ottenimento di anticorpi ad alta affinità.

Nel secondo periodo del suo dottorato Stefano Carganico si è occupato della sintesi di peptidi fluorescenti a struttura secondaria stabilizzata quali potenziali farmaci peptidici antitumorali che possano interagire con l'apparato regolatore della Translation Initiation. Tali peptidi, modificati in opportune posizioni,  $i-i+4$ , con amminoacidi modificati con gruppi alchilici e azidici su catene laterali di lunghezze differenti, sono in grado di formare cicli contenenti triazolo attraverso una reazione di Huisgen catalizzata da ione rame (click chemistry con strategie precedentemente messe a punto presso PeptLab (JOC 2008,

*EurJOC 2008, EurJOC 2009). Il ponte formato ha lo scopo di stabilizzare strutture ad  $\alpha$ -elica nei peptidi, per aumentarne la biodisponibilità e la permeabilità delle membrane cellulari, e perciò favorire il drug delivery intracellulare. A questo scopo il dottorando ha dovuto mettere a punto la sintesi di un pannello di nuovi amminoacidi modificati per la click chemistry e con essi ha sintetizzato una collezione di ciclopeptidi contenenti triazolo con ponti di diverse dimensioni e orientazioni. Tale collezione di peptidi costituisce il punto di partenza di un approccio combinatoriale per la definizione delle migliori condizioni di stabilizzazione della struttura secondaria di ciclopeptidi ad opera di ponti contenenti l'anello triazolico, miemntici di lattami. I peptidi sintetizzati saranno utili per una dettagliata analisi strutturale (NMR in soluzione), fluorescences polarization assays per misurare l'affinità con le proteine target e templated click chemistry ovvero ciclizzazione dei peptidi lineari in presenza di catalizzatori proteici.*

*I risultati ottenuti dal dottorando hanno portato alla pubblicazione come primo nome di un articolo su rivista internazionale e di tre capitoli di libro. Inoltre sono in preparazione due pubblicazioni di cui una sar preceduta dal deposito di domanda di brevetto europeo. Inoltre il dottorando ha presentato 2 comunicazioni a congressi nazionali ed internazionali.*

*Considerati i risultati ottenuti, la notevole mole di lavoro effettuata, l'indipendenza mostrata nello svolgimento del lavoro (sia presso PeptLab che nel contesto del Laboratory of Translational Research della Harvard Medical School, come riportato dal Prof. Michael Chorev) il dottorando Stefano Carganico denota un'ottima attitudine alla ricerca scientifica multidisciplinare partendo da notevoli competenze di chimica organica. Lo ritengo perciò pienamente meritevole di sostenere l'esame finale e infine ottenere il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche.*

Pertanto il dottorando

è ammesso alla Prova Finale con ampia soddisfazione del Collegio dei Docenti

## 5. DI CREDICO BARBARA

Titolo Tesi: Sintesi di Metal Organic Framework

Tutore: Dr. Maurizio Peruzzini

- a) 5 lavori pubblicati e 3 inviati;
- b) ha partecipato a 4 scuole e 9 congressi;
- c) ha seguito un numero sufficiente di seminari;
- d) ha seguito i 4 corsi organizzati dal CD e ha partecipato al test di valutazione relativo superandolo con 17/20.
- e) Il collegio ha ricevuto la seguente relazione dal tutore

*La Dr.ssa Barbara Di Credico, studentessa al terzo ed ultimo anno di Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche, sotto la mia diretta supervisione scientifica, ha svolto nel corso del*



*2009 una matura e completa attività di studio e di ricerca nel laboratorio sponsorizzato dal Progetto FIRENZE HYDROLAB presso ICCOM CNR di Sesto Fiorentino che dirigo.*

*Come per gli anni precedenti, il giudizio sul lavoro di ricerca portato avanti dalla Dr.ssa Di Credico è decisamente positivo e si è completamente e compiutamente svolto in perfetto accordo con quanto pianificato nel piano originale di sviluppo della Tesi di Dottorato dal titolo Sintesi di complessi organometallici con leganti polidentati e loro potenziale impiego come metal-organic frameworks. Il lavoro di ricerca si è svolto sotto la mia diretta supervisione ed in collaborazione con altri colleghi di ICCOM-CNR, in primis la Dr.ssa Gianna Reginato ed il Dr. Luca Gonsalvi, ricercatori presso ICCOM CNR, e il Dr. Andrea Rossin, assegnista FIRENZE HYDROLAB nel gruppo di ricerca di cui sono responsabile.*

*Al pari degli anni precedenti non posso che mantenere inalterato ed anzi, eventualmente, rinforzare il mio giudizio altamente positivo del lavoro svolto dalla Dr.ssa Di Credico la quale ha sviluppato la sua attività con impegno, continuità e ottima capacità di pianificare ed organizzare il proprio lavoro dimostrando uno spiccato interesse per l'attività di ricerca, un ottimo spirito di collaborazione con gli altri membri, giovani e meno giovani, del gruppo di ricerca e una non comune capacità di superare i numerosi ostacoli che continuamente si frappongono lungo lo sviluppo di un lavoro di ricerca centrato sulla progettazione e sulla sintesi di nuove piattaforme molecolari. La Dottoressa Di Credico ha, nell'opinione del Supervisore, completamente acquisito una compiuta capacità di pianificare e gestire il proprio lavoro di ricerca ottenendo risultati significativi nell'avanzamento del piano scientifico programmato in ognuno dei suoi punti significativi.*

*La Dr.ssa Di Credico si è dimostrata capace non solo di gestire completamente il proprio lavoro di ricerca, ma di partecipare con ottima capacità alla preparazione di comunicazioni scientifiche e delle relative note a stampa. Parte del lavoro di ricerca che farà parte della tesi dottorale di Barbara Di Credico è stato pubblicato nel corso degli ultimi due anni su prestigiose riviste quali Chemistry, A European Journal e Crystal Growth & Design mentre un altro manoscritto relativo alla sintesi di una famiglia di nuovi leganti tiazolici ed ossazolici è in corso di pubblicazione. Altri lavori seguiranno immediatamente dopo la discussione della tesi nel corso del 2010 ed affronteranno la chimica di coordinazione ed organometallica di queste molecole e le loro potenziali applicazioni nello storage di molecole gassose, tra cui idrogeno, e, in una prospettiva a più lungo termine, le loro performance catalitiche.*

*La Dr.ssa Di Credico ha personalmente presentato i risultati più importanti del suo lavoro di tesi tramite comunicazioni orali e comunicazioni poster a congressi internazionali e nazionali dimostrando completa padronanza della propria ricerca e una completa capacità di proporre e difendere i propri risultati scientifici sia in italiano che in lingua inglese. Nel corso del mese di ottobre 2009, la Dottoranda ha trascorso un breve stage di tre settimane presso il gruppo di ricerca del Professor Bruno Therrien presso l'Università di Neuchâtel*

*in Svizzera. Durante il periodo trascorso all'estero la Dr.ssa Di Credico ha posto le basi per una preziosa collaborazione tesa alla sintesi di composti polinucleari e polimetallici con interessanti proprietà host-guest e potenziali applicazioni nell'ambito del riconoscimento molecolare e dell'attività citotossica.*

*Il giudizio che, al termine del triennio di lavoro, posso dare della Dr.ssa Di Credico è quindi altamente positivo e tale da meritare alla Dottoranda un vivo plauso per il lavoro svolto con dedizione e capacità.*

*In conclusione, a mio parere, la Dr.ssa Di Credico è completamente matura per il conferimento del titolo di Dottore di Ricerca e per svolgere immediatamente un lavoro di elevata qualificazione sia nell'industria che nell'Accademia.*

*Restando a disposizione per ogni ulteriore chiarimento, distintamente saluto.*

*Sesto Fiorentino, 6 novembre 2009*

*Dr. Maurizio Peruzzini*

*Direttore di Ricerca DPM ICCOM CNR*

Pertanto il dottorando

è ammesso alla Prova Finale con ampia soddisfazione del Collegio dei Docenti

## **6. FARALLI Cristian**

Titolo Tesi: Dinamica Molecolare ab initio di Sistemi in Fase Condensata

Tutore: Prof. Vincenzo Schettino

a) presenta 4 lavori pubblicati

b) 4 comunicazioni a congressi;

c) ha seguito un numero sufficiente di seminari;

d) ha seguito i 4 corsi organizzati dal CD e ha partecipato al test di valutazione relativo superandolo con 17/20.

e) La commissione ha ricevuto la seguente relazione dal tutore:

*Durante il periodo del Dottorato il Dott. Faralli ha svolto una attività di ricerca di carattere computazionale con metodi di dinamica molecolare sia ab initio che classica. La sua attenzione si è focalizzata su vari aspetti di questa tematica e cioè:*

*a) studio della dinamica di solvatazione di ioni mono e bivalenti in metanolo analizzando le sfere successive di solvatazione in funzione della carica e della dimensione dello ione ed analizzando anche come la struttura del solvente si modifica per la presenza del soluto. E' interessante il risultato ottenuto relativamente al trasferimento di carica ione-solvente che accompagna il processo di solvatazione;*

*b) messa a punto di un modello di potenziale per solventi fluorurati e studio conformazionale di peptidi in questi solventi;*

*c) messa a punto di un codice originale per analisi di Bader;*

*d) studio con dinamica molecolare dei meccanismi di alcune reazioni organiche complesse in soluzione.*

*In complesso giudico molto positivamente la attività svolta dal Dott. Faralli, anche tenendo conto che alcuni dei risultati ottenuti sono in corso di pubblicazione.*

Pertanto il dottorando

è ammesso alla Prova Finale con soddisfazione del Collegio dei Docenti

## **7. LAGI Marco**

Titolo Tesi: Il Ruolo dell'Acqua nella Struttura e nella Dinamica di Biomolecole: Diffusione di Neutroni e Simulazioni

Tutore: Prof. Piero Baglioni

a) presenta 15 lavori a stampa, 2 accettati e 1 inviato per la pubblicazione ;

b) 6 partecipazioni a congressi;

c) ha seguito un numero sufficiente di seminari, non ha seguito i 4 corsi organizzati dal CD ma un corso di meccanica statistica presso il MIT. (Allega la certificazione rilasciata dal Prof. Chen)

d) La commissione ha ricevuto la seguente relazione dal tutore:

*Nel terzo anno di attività, nell'ambito del XXII Ciclo di Dottorato in Scienze Chimiche, il candidato Marco Lagi ha sviluppato alcune problematiche connesse al progetto "Dinamica di sistemi complessi: acqua, proteine e loro interazioni". In particolare, il candidato ha individuato nuove caratteristiche nella dinamica di proteine idratate, mostrando come nell'intervallo di tempi 1 ps - 1 ns i correlatori di densità delle proteine decadano logicamente. Questo fenomeno è previsto dalla mode coupling theory (la più popolare teoria dello stato liquido) per sistemi vicini a particolari transizioni vetrose. Ha quindi confermato l'analogia esistente tra la dinamica delle proteine e quella dei vetri. Il candidato ha svolto la sua attività di ricerca in modo accurato, efficace e autonomo, producendo eccellenti risultati che sono stati pubblicati nelle migliori riviste a livello internazionale.*

*Per l'impegno profuso e i risultati sperimentali conseguiti da Marco Lagi, sono convinto che il candidato meriti il titolo di Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche.*

Pertanto il dottorando

è ammesso alla Prova Finale con ampia soddisfazione e i complimenti del Collegio dei Docenti

## 8. LUMINI Marco

Titolo Tesi: Nuove proline modificate per applicazioni in peptidomimetica

Tutore: Prof. Alberto Brandi

- a) presenta 2 lavori pubblicati e 1 in preparazione;
- b) 8 comunicazioni a congresso e 2 partecipazioni a scuole;
- c) ha seguito un numero sufficiente di seminari;
- d) ha seguito i 4 corsi organizzati dal CD e ha partecipato al test di valutazione relativo superandolo con 16/20.
- e) La commissione ha ricevuto la seguente relazione dal tutore:

*Il Dott. Marco Lumini ha svolto una tesi sperimentale di Dottorato in Scienze Chimiche svolgendo ricerche sulla sintesi di “Nuove proline modificate per applicazioni in peptidomimetica”. Le proline sono degli amminoacidi estremamente importanti per le proprietà strutturali che inducono in una catena peptidica, e che spesso sono associate alla attività biologica del peptide, o della porzione di proteina. La peptidomimetica una disciplina che si occupa della sintesi di composti di natura peptidica e non, in grado di mimare conformazione ed attività di peptidi naturali coinvolti in processi biologici di vario genere, e nello stesso tempo di migliorarne la stabilità alla degradazione. Nell’ambito di questo progetto il Dott. Lumini ha sviluppato due diversi aspetti. Da una parte la sintesi di proline sostituite sul carbonio in  $\alpha$  e contenenti funzionalità di interesse per l’interazione dei peptidi con i recettori biologici, dall’altra la sintesi di  $\beta$ -omoprolina mimetiche di unità dipeptidiche. Per la prima parte del progetto, la sintesi di proline  $\alpha$ -sostituite, ha sviluppato due tecniche innovative, come la reazione di cross-metatesi con complessi di rutenio e la reazione di “click chemistry”, applicandole, rispettivamente, ad allilproline ed alla propargil proline. I risultati interessanti sono stati oggetto di due pubblicazioni. Per la seconda parte, ha messo a punto una metodologia originale del nostro gruppo di ricerca che consiste nella trasposizione termica in ambiente acido di isossazolidine-5-spirocilopropani ottenute, a loro volta, per cicloaddizione di nitroni ciclici pentatomici ad alchilideneciclopropani. Fra le  $\beta$ -omoprolina sintetizzate, il Dott. Lumini ha principalmente studiato una nuova  $\beta$ -omoprolina contenente un residuo idrossimetilico che la rende un mimetico del dipeptide prolina-serina. Su questo lavoro una pubblicazione in fase di preparazione. Le  $\beta$ -omoprolina sintetizzate sono state impiegate nella sintesi di piccoli peptidi mirati all’attività antivirale che, dopo la raccolta dei dati biologici, potranno essere oggetto di una nuova pubblicazione. Nel corso del II anno di Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche il Dott. Lumini ha svolto uno stage di otto mesi presso l’Institut für Organische und Biomolekulare Chemie della Georg-August-Universität Göttingen, Germany per svolgere ricerche, sotto la supervisione del Prof. Armin de Meijere, sulla sintesi di  $\beta$ -lattami spirofusi con anelli ciclopropanici, e le loro applicazioni nella sintesi di polimeri a natura poli- $\beta$ -amminoacidica. Il Dott. Lumini ha svolto le ricerche con impegno*

*e competenza, ottenendo interessanti risultati, e aprendo la strada, con la sua ricerca, a nuovi sviluppi della ricerca nel nostro gruppo. Esprimo pertanto un giudizio pienamente positivo sul Dott. Marco Lumini proponendone l'ammissione alla Discussione della Tesi di Dottorato.*

Pertanto il dottorando

è ammesso alla Prova Finale con soddisfazione del Collegio dei Docenti

## 9. MATERA Irene

Titolo Tesi: Studi Strutturali di Metallo-enzimi Coinvolti in Processi Ossidativi

Tutore: Prof. Andrea Scozzafava

a) 4 lavori pubblicati;

b) 5 comunicazioni a congressi e partecipazione a 2 scuole;

c) ha seguito un numero sufficiente di seminari e i 4 corsi organizzati dal CD.

d) ha seguito i 4 corsi organizzati dal CD e ha partecipato al test di valutazione relativo superandolo con 17/20.

e) La commissione ha ricevuto la seguente relazione dal tutore:

*La Dott.sa Irene Matera ha frequentato il corso di dottorato di ricerca XXII ciclo svolgendo il proprio lavoro di ricerca nel laboratorio di Bioinorganica del Dipartimento di Chimica.*

*In questo periodo ha acquisito una buona conoscenza dei principali metodi che stanno alla base della determinazione strutturale di macromolecole biologiche mediante cristallografia a raggi-X. In particolare ha appreso le tecniche di cristallizzazione di macromolecole biologiche e le tecniche di raccolta di dati cristallografici, utilizzando la strumentazione del Centro interdipartimentale di cristallografia strutturale. Ha inoltre condotto numerosi viaggi con lo scopo di raccogliere dati cristallografici utilizzando la radiazione di sincrotrone a Trieste (Elettra), Amburgo (DESY) e Grenoble (ESRF).*

*Ha una buona conoscenza dei programmi che vengono utilizzati per la soluzione, l'affinamento e l'analisi di strutture cristallografiche di macromolecole biologiche.*

*L'argomento della sua tesi ha riguardato lo studio strutturale di metalloenzimi, in particolare ossigenasi e ossidasi coinvolte in processi di biodegradazione, allo scopo di delucidarne il meccanismo di reazione e la specificità di substrato.*

*La Dott.sa Irene Matera ha affrontato con impegno e serietà lo studio di questi argomenti e ha dimostrato buone capacità sia nel condurre gli esperimenti che nell'analisi dei dati ottenuti.*

*La Dott.sa Irene Matera si è applicata con passione al lavoro di ricerca, che ha condotto con un sufficiente grado di indipendenza e apportandovi contributi originali.*

Pertanto il dottorando

è ammesso alla Prova Finale con ampia soddisfazione del Collegio dei Docenti

#### 10. **MORI Mirko**

Titolo Tesi: Metodologie NMR di Biomolecole per lo Stato Liquido e per lo Stato Solido

Tutore: Prof. Mario Piccioli

- a) 2 lavori pubblicati e 2 inviati per la pubblicazione;
- b) 5 comunicazioni a congressi;
- c) ha seguito un numero sufficiente di seminari;
- d) ha seguito i 4 corsi organizzati dal CD e ha partecipato al test di valutazione relativo superandolo con 16/20.
- e) La commissione ha ricevuto la seguente relazione dal tutore:

*Nel Corso dei tre anni di Dottorato, Mirko Mori ha svolto con intensità e dedizione una continuativa attività di ricerca completamente attinente alla tematica della tesi da egli scritta. I risultati ottenuti sono assolutamente soddisfacenti e sono stati pubblicati o sono in corso di sottomissione su alcune delle riviste più autorevoli del settore chimico, quali Proc. Natl. Acad. Sci USA. Ha saputo portare avanti le tematiche proposte con indipendenza ed intraprendenza, ma anche con grande prudenza e consapevolezza. Ha messo in evidenza rimarchevoli doti di analisi critica, capacità di valutazione, capacità analitiche. Di particolare rilievo il fatto che MM abbia saputo operare anche nell'ambito di collaborazioni esterne al suo laboratorio di provenienza. E' riuscito pienamente a fungere da collegamento tra i vari laboratori coinvolti nelle collaborazioni che lo hanno visto protagonista. Egli si è rivelato infatti particolarmente capace anche nella gestione delle relazioni umane sia con colleghi coetanei che con ricercatori più anziani di vari laboratori italiani ed europei con cui è venuto in contatto nel corso del suo Progetto di Dottorato. Da un punto di vista più fondamentale, MM ha saputo costruirsi un solidissimo background come spettroscopista NMR. Attualmente, egli è del tutto indipendente in ogni aspetto della spettroscopia NMR, della discussione di aspetti teorici e dalla scrittura di sequenze di impulsi innovative, anche molto specifiche e mirate, agli aspetti pratici ed operativi in tutti gli spettrometri in soluzione a basso, medio ed alto campo, all'utilizzo di sonde ed altri componenti hardware non convenzionali. In estrema sintesi, MM ha avuto la formazione tipica del biologo strutturale ma anche quella dello spettroscopista capace di affrontare e risolvere i problemi associati allo sviluppo di sequenze di impulsi ed alla analisi ed interpretazione di fenomeni complessi quali quelli di rilassamento auto e cross-correlato. Possiede capacità di finalizzazione e di un spirito pratico che lo porta naturalmente a procedere verso la conclusione del lavoro iniziato. Finalmente, un commento è doveroso sulla qualità umane che si sono rivelate eccellenti. Egli ha mostrato, oltre ad una sempre presente e più che responsabile disponibilità all'impegno, anche di possedere doti di flessibilità e di capacità di rapporto con colleghi e membri senior del laboratorio.*

*In sintesi, è mio parere che MM sia altamente meritevole di conseguire il titolo di Dottore di ricerca in Scienze Chimiche.*

Pertanto il dottorando

è ammesso alla Prova Finale con ampia soddisfazione del Collegio dei Docenti

#### 11. **PARMEGGIANI Camilla**

Titolo Tesi: Targeting glycosyl hydrolases inhibition: synthesis of polyhydroxylated alkaloids and their iminosugar analogs

Tutore: Prof. Andrea Goti

a) presenta 3 lavori pubblicati, 1 inviato e 3 in preparazione,

b) 16 comunicazioni a congressi e una scuola;

c) ha seguito un numero sufficiente di seminari;

d) ha seguito i 4 corsi organizzati dal CD e ha partecipato al test di valutazione relativo superandolo con 16/20.

e) La commissione ha ricevuto la seguente relazione dal tutore:

*Relazione sull'attività di ricerca svolta da Camilla Parmeggiani nell'ambito del Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche XX ciclo presso l'Università degli Studi di Firenze*

*Titolo della ricerca Targeting glycosyl hydrolases inhibition: Synthesis of polyhydroxylated alkaloids and their iminosugar analogs*

*Nell'arco temporale del Dottorato di Ricerca XXII ciclo (anni 2007-2009) Camilla Parmeggiani si è occupata di svariate sintesi di composti azotati glicomimetici (imminozuccheri) aventi scheletro pirrolidinico e pirrolizidinico mediante l'applicazione di metodi sintetici originali. Sono stati ottenuti una grande serie e varietà di alcaloidi naturali poliossidrilati e di loro analoghi non naturali per lo studio delle proprietà biologiche quali inibitori di glicosidasi e glicosiltransferasi (enzimi target per la terapia di molte patologie rilevanti) e per poter derivare informazioni sulle relazioni struttura/attività. Nel campo dei prodotti naturali particolarmente rilevanti sono state le sintesi di uniflorina A e della casuarina 6-O-glucoside che non avevano precedenti nella letteratura. Altrettanto importanti, anche ai fini degli studi biologici, le sintesi delle glicosilpirrolizidine, mimetici di disaccaridi. Queste sintesi hanno permesso l'avvio di importanti collaborazioni internazionali con vari gruppi di ricerca, che si occupano dell'isolamento e della espressione di glicosidasi, di studi cristallografici dei complessi enzima/inibitore e della loro modellistica molecolare. Camilla Parmeggiani ha anche trascorso un periodo di 4 mesi di ricerca presso la Freie Universitaet di Berlino per svolgere sintesi in collaborazione con il gruppo del Prof. Reissig.*

*L'attività di ricerca della candidata si è concretizzata nella pubblicazione di 3 articoli in giornali ISI, oltre 1 manoscritto già spedito per la pubblicazione e 2 nella fase finale di*

preparazione. Camilla Parmeggiani ha presentato personalmente svariate comunicazioni a congressi, diverse delle quali orali.

Il giudizio sull'attività di ricerca svolta Camilla Parmeggiani nel corso del Dottorato di ricerca è estremamente positivo. Camilla ha subito mostrato capacità molto spiccate per il lavoro sperimentale di laboratorio, occupandosi in prima persona di tutte le preparazioni, separazioni e determinazioni analitiche descritte nel suo lavoro di tesi, ed ha avuto una grande crescita nel corso dei tre anni sotto l'aspetto della personalità, sicurezza e propositività arrivando a gestire la progettazione e l'esecuzione di progetti con ampia autonomia. È in grado di affrontare problematiche ed aspetti di diversa natura, anche interdisciplinare, ed ha svolto compiti di istruzione supervisione di laureandi con ottimi risultati.

Pertanto il dottorando

è ammesso alla Prova Finale con ampia soddisfazione del Collegio dei Docenti

## 12. PONETI Giordano

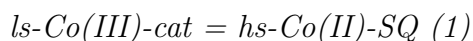
Titolo Tesi: Chemical and Photoinduced Effects on the Dynamics of the Magnetic Properties of Bistable Materials

Tutore: Prof. Roberta Sessoli

- a) presenta 6 lavori pubblicati, 1 in stampa, 2 inviati;
- b) 12 comunicazioni a congressi;
- c) ha seguito un numero sufficiente di seminari;
- d) ha seguito i 4 corsi organizzati dal CD e ha partecipato al test di valutazione relativo superandolo con 15/20.
- e) La commissione ha ricevuto la seguente relazione dal tutore:

*Il candidato ha svolto una tesi sperimentale riguardante principalmente lo studio delle proprietà magnetiche di sistemi molecolari sotto l'effetto di una radiazione capace di indurre uno stato metastabile grazie ad una transizione elettronica. Sono state prese in esame due classi di materiali con proprietà fisiche diverse e questo giustifica la presenza di un tutore e di un cotutore.*

*La principale attività svolta dal candidato ha riguardato sistemi molecolari bistabili a base di complessi cobalto:diossolene. Si tratta di complessi di cobalto con leganti organici redox-attivi in grado di dare luogo all'equilibrio redox sotto riportato*



*che mostra il processo di tautomeria di valenza in composti a base di Co e orto-diossoleni, in cui si ha un equilibrio tra due diversi isomeri redox:  $ls-Co(III) - Cat$ , con lo ione  $Co(III)$  nello stato di basso spin ed il legante organico nella configurazione binegativa (catecolato), e  $hs-Co(II) - SQ$ , ove lo ione metallico è ad alto spin ed il legante è il radicale monoanionico semichinonato. Il processo formalmente implica un trasferimento elettronico fra il*



legante e il metallo. Tale processo pu avvenire sia in soluzione che allo stato solido, sia per riscaldamento che per irraggiamento luminoso. Il candidato ha intrapreso la sintesi di nuovi sistemi in grado di dare tautomeria di valenza con successo, caratterizzando l'equilibrio in soluzione di uno di essi sia in funzione della variazione di temperatura che in funzione del solvente..1 Successivamente si è dedicato allo studio dell'influenza dell'intorno cristallino sul tautomerismo termico e fotoindotto, ottenendo un nuovo sistema molecolare altamente reattivo agli stimoli luminosi.2 L'analisi dell'effetto dell'impacchettamento cristallino è stata poi approfondita dissolvendo il nuovo composto in un intorno cristallino inerte ed isomorfo.3 Nel frattempo il candidato ha approfondito lo studio del fenomeno della tautomeria fotoindotta in questi sistemi utilizzando la luce di sincrotrone presso l'ESRF di Grenoble, con spettroscopie basate sull'assorbimento di raggi X, (XAS e EXAFS) riuscendo a dare piena descrizione degli stati elettronici coinvolti e delle caratteristiche strutturali delle fasi presenti nel processo termico e fotoattivato.4,5,6 E' stato anche possibile evidenziare una foto-attivazione reversibile indotta dai raggi X molli. Lo studente si è dimostrato estremamente attivo anche nell'instaurare nuove collaborazioni con gruppi esterni al laboratorio: ha infatti sviluppato in modo autonomo la caratterizzazione della tautomeria di valenza fotoindotta di un sistema Co:diossolene a stechiometria 1:2 proveniente da un laboratorio australiano.7

Le competenze acquisite nelle tecniche di indagine magnetica sotto irraggiamento sono state sfruttate anche per la caratterizzazione di materiali diversi, in particolare nanocompositi ibridi a base di nanoparticelle metalliche. Il candidato ha partecipato ad una collaborazione con un laboratorio del centro nazionale per le nanotecnologie di Lecce (NNL) volta alla caratterizzazione magnetica di nanoparticelle metalliche interfacciate con un semiconduttore, rivelando l'importanza del magnetismo interfasale in nanosistemi metallici.8 Lo studio delle proprietà magnetiche fotoindotte in questi sistemi è attualmente in corso.

L'altra classe di materiali studiati è rappresentata da sistemi molecolari che presentano bistabilità magnetica dovuta alla presenza di una barriera dovuta all'anisotropia, altrimenti noti come magneti a singola molecola. Due tipi di sistemi, uno contenente ioni DyIII e l'altro ioni FeIII sono stati principalmente investigati dal candidato mediante la misura della suscettività magnetica in corrente alternata (ac).9,10 Le competenze acquisite nello studio della dinamica mediante la misura della suscettività ac e nella fotoinduzione di stati metastabili ha permesso al candidato di mettere a punto un sistema di misura sotto irraggiamento della suscettività ac fino a frequenze di 25 kHz. In particolare, data la forte dipendenza della dinamica dei magneti a singola molecola dalla temperatura, è stato messo a punto un metodo di valutazione del riscaldamento del campione irraggiato basato sulla rilevazione della transizione a superconduttori di alcuni metalli. Questo set-up è stato completato solo recentemente ma le prime misure su campioni nei quali la fotoinduzione genera uno stato di spin elevato non hanno evidenziato nessun rilassamento lento tipico di magneti a singola molecola. In questa ultima attività il candidato è stato affiancato da

*un laureando in Fisica e Astrofisica, dimostrando una buona attitudine a condurre ricerche in collaborazione ed alla guida di studenti meno esperti. Una buona predisposizione alla didattica ed alla divulgazione scientifica è emersa anche nella attività svolta dal candidato presso OPEN LAB e durante la messa a punto di una esposizione scientifica sul magnetismo molecolare in collaborazione con il Prof. M. Verdaguer, ad esso regolarmente in programma presso OPEN LAB.*

*La continuità e l'impegno mostrato, le competenze acquisite, le iniziative prese autonomamente nonch la qualità dei risultati ottenuti ci permettono di esprimere un giudizio estremamente positivo sull'attività svolta dal candidato e sul grado di maturità raggiunta. Il candidato è, a nostra opinione, pienamente meritevole di conseguire il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche.*

- 1) Dei, A.; Feis, A.; Poneti, G.; Sorace, L. *Inorg. Chim. Acta* 2008, 361, 3842-3846.
- 2) Dapporto, P.; Dei, A.; Poneti, G.; Sorace, L. *Chem.-Eur. J.* 2008, 14, 10915-10917.
- 3) Dei, A.; Poneti G.; Sorace, L. *submitted*.
- 4) Poneti, G.; Mannini, M.; Sorace, L.; Sainctavit, Ph.; Arrio, M.-A.; Rogalev, A.; Wilhelm, F., Dei, A. *ChemPhysChem* 2009, 10, 2090-2095.
- 5) Poneti, G.; Mannini, M.; Sorace, L.; Sainctavit, Ph.; Arrio, M.-A.; Otero, E.; Criginski Cezar, J.; Brookes, N.; Dei, A., *submitted*.
- 6) Poneti, G.; Mannini, M.; Sorace, L.; Dei, A. *et al.*, *manoscritto in scrittura*.
- 7) Mulyana, Y.; Poneti, G.; Moubaraki, B.; Murray, K. S.; Abrahams, B. F., Sorace, L.; Boskovic, C., *Dalton* 2009, *in stampa*.
- 8) Deka, S.; Falqui, A.; Sangregorio, C.; Poneti, G.; Morello, G.; De Giorgi, M.; Gianini, C.; Cingolani, R.; Manna, L.; Cozzoli, P. D. *J. Am. Chem. Soc.* 2009, 131, 12817-12828.
- 9) Poneti, G.; Bernot, K.; Bogani, L.; Caneschi, A.; Sessoli, R.; Wernsdorfer, W.; Gatteschi, D. *Chem. Commun.* 2007, 1807-1809.
- 10) Gregoli, L.; Danieli, C.; Barra, A.-L.; Neugebauer, P.; Pellegrino, G.; Poneti, G.; Sessoli, R.; Cornia, A. *Chemistry Eur. J.*, 2009, 15, 6456-646

Pertanto il dottorando

è ammesso alla Prova Finale con ampia soddisfazione del Collegio dei Docenti

### 13. RUGI Francesco

Titolo Tesi: Sviluppo di metodi per la determinazione di metalli pesanti e in tracce mediante HR-ICP-MS e sua applicazione su campioni di rilevanza ambientale

Tutore: Prof. Roberto Udisti

a) 3 pubblicazioni, 2 inviate;

- b) 17 comunicazioni a congressi internazionali e 36 nazionali;
- c) ha seguito un numero sufficiente di seminari e i 4 corsi organizzati dal CD.
- d) ha seguito i 4 corsi organizzati dal CD e ha partecipato al test di valutazione relativo superandolo con 16/20.
- e) La commissione ha ricevuto la seguente relazione dal tutore:

*Il Dott. Rugi Francesco ha svolto con molta passione e con elevata professionalita' scientifica il lavoro che si era proposto nell'arco dei tre anni di Dottorato. I risultati scientifici e tecnologici ottenuti sono completamente soddisfacenti e sono oggetto di un numero significativo di pubblicazioni su riviste internazionali (gia' pubblicate, in corso di pubblicazione e in preparazione) e di una nutrita serie di comunicazioni a congressi nazionali e internazionali. Come Tutore, sono davvero soddisfatto dell'attivita' svolta dal Dott. Francesco Rugi, che ha mostrato intraprendenza, originalita', autonomia ed efficienza. Inoltre, le sue doti umane le sue acquisite capacita' tecniche e scientifiche gli hanno permesso di stringere buone e fattive collaborazioni con gruppi di ricerca all'interno del Dip. di Chimica e in altre sedi italiane e all'estero. In particolare, nell'ambito del Progetto Internazionale ANDRILL, ha svolto attivita' di ricerca di alto livello in collaborazione con l'Istituto AWI di Bremerhaven (Germania) e con numerosi gruppi italiani nelle Universita' di Siena, Genova, Torino e Palermo. Per tali ragioni, propongo di attribuire al Dott. Francesco Rugi il migliore giudizio possibile per la valutazione finale della Tesi di Dottorato.*

Pertanto il dottorando

è ammesso alla Prova Finale con soddisfazione del Collegio dei Docenti

#### 14. **SARTI Niko**

Titolo Tesi: Clonaggio, Espressione e Purificazione di Collagenasi Umane e Caratterizzazione Biofisica della loro Interazione con il Substrato e con Peptidi Modello

Tutore: Prof. Claudio Luchinat

- a) 1 lavoro pubblicato e 1 lavoro inviato;
- b) 1 comunicazione;
- b) ha seguito un numero sufficiente di seminari;
- d) ha seguito i 4 corsi organizzati dal CD e ha partecipato al test di valutazione relativo superandolo con 13/20.
- e) La commissione ha ricevuto la seguente relazione dal tutore:

*Niko Sarti è stato coinvolto nel clonaggio, nell'espressione e nella purificazione di metalloproteinasasi di matrice umane implicate nella degradazione dei componenti della matrice extracellulare e nella liberazione di citochine e peptidi da precursori proteici. In particolare, ha clonato, espresso e caratterizzato la MMP-1 sia nella forma intera che come*

*domini separati. Inoltre, il candidato ha progettato ed espresso mutanti delle stesse proteine mediante mutagenesi sito specifica al fine di aumentarne la stabilità all'auto-proteolisi. La sua expertise nell'utilizzare tecniche di espressione di proteine ricombinanti e di purificazione proteica è perciò di ottimo livello. Niko Sarti ha inoltre acquisito una buona esperienza nella caratterizzazione biofisica delle proteine, studiando le proteine purificate con numerose tecniche quali NMR, light scattering, spettroscopie UV-vis. Il candidato ha una profonda conoscenza della letteratura correlata al suo progetto, e' ben integrato nel gruppo di ricerca e si e' sempre dimostrato attivo nel fornire nuove idee per lo sviluppo del progetto.*

*Niko Sarti e' coautore di una pubblicazione sul Journal of Biological Chemistry, di un articolo già' sottomesso al Journal of Medicinal Chemistry e di un manoscritto in preparazione. Il candidato si è molto impegnato sul suo lavoro e durante questi tre anni la sua personalità scientifica è cresciuta nel modo atteso per uno studente di dottorato. La sua attività e produzione scientifica è giudicata globalmente soddisfacente.*

Pertanto il dottorando

è ammesso alla Prova Finale

#### 15. **SMEAZZETTO Serena**

Titolo Tesi: Studio di Proteine Implicate nel Metabolismo del Calcio

Tutore: Prof. Maria Rosa Moncelli (manca relazione)

a) 2 lavori pubblicati, 1 inviato;

b) 5 comunicazioni a congresso;

c) ha seguito un numero sufficiente di seminari e i 4 corsi organizzati dal CD.

d) ha seguito i 4 corsi organizzati dal CD e ha partecipato al test di valutazione relativo superandolo con 13/20.

e) La commissione ha ricevuto la seguente relazione dal tutore:

*La dottoranda ha dimostrato un notevole impegno, in condizioni ambientali molto difficili, nello sviluppare un nuovo modello sperimentale di membrana biologica e nel mettere a punto e sviluppare un set-up sperimentale all'avanguardia che permette di condurre misure di conducibilità in flusso ed utilizzare tecniche elettrochimiche su una stessa membrana biomimetica, applicabile allo studio di proteine di membrana.*

*I risultati dello studio del fosfolambano sono notevoli dal punto di vista sperimentale e scientifico. Infatti quest'anno, grazie ai risultati ottenuti, la dottoranda ha ricevuto i seguenti premi:*

*- maggio 2009 3 premio ex-quo (400 euro) nel Concorso Internazionale Europa e Giovani*

2009, sezione Università bandito dall'IRSE, Istituto Regionale di Studi Europei del Friuli Venezia Giulia. Con la motivazione:

*Prosa asciutta e registro adatto ad un qualificato articolo scientifico per descrivere il progetto di ricerca che la studentessa in Scienze Chimiche sta attualmente seguendo e riguarda lo sviluppo e la messa a punto di un modello sperimentale di membrana biologica: Studio del fosfolambano incorporato in nanoBLMs. Buona la bibliografia.*

*- A luglio del 2009 non solo l'abstract :Study of phospholamban incorporated in nanoBLMs è stato selezionato (vincendo la borsa per coprire le spese di viaggio e di soggiorno) per la partecipazione al 9th Young Scientist Forum and 34th FEBS Congress, Praga 2-9 luglio 2009, ma è stato scelto anche per una presentazione orale.*

*Pertanto il giudizio sul lavoro svolto è ottimo.*

Pertanto il dottorando

è ammesso alla Prova Finale con soddisfazione del Collegio dei Docenti

#### 16. **TATTINI Lorenzo**

Titolo Tesi: Synthesis and Characterization of Nanosystems for Polyfunctional Textile (Sintesi e Caratterizzazione di Nanosistemi per Tessili Polifunzionali)

Tutore: Dr. Pierandrea Lo Nostro

- a) ha presentato 1 lavoro pubblicato e uno inviato;
- b) 7 comunicazioni a congressi;
- c) ha seguito un numero sufficiente di seminari;
- d) ha seguito i 4 corsi organizzati dal CD e ha partecipato al test di valutazione relativo superandolo con 14/20.
- e) La commissione ha ricevuto la seguente relazione dal tutore:

*Nel terzo anno di attività, nell'ambito del XXII ciclo di Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche, il candidato Lorenzo Tattini ha svolto un'ampia attività di ricerca connessa al progetto Sintesi e caratterizzazione di nanosistemi per tessili polifunzionali. In particolare, il candidato ha approntato misure di PIXE e proprietà elettromeccaniche su polveri di nanoparticelle PZT pure e in miscela. Le particelle pure derivavano da diversi batch di reazione caratterizzati da differenti rapporti stechiometrici Pb:Zr:Ti. Sono state anche effettuate misure di dynamic light-scattering, potenziale z e FTIR su dispersioni acquose delle nanoparticelle. Le misure hanno confermato che le nanoparticelle prodotte hanno effettivamente un'elevata risposta elettrica alle sollecitazioni meccaniche: questo risultato appare essere particolarmente importante in quanto l'argomento del lavoro di ricerca era proprio la sintesi di nanomateriali con proprietà piezoelettriche, per futuri scopi applicativi in diversi settori. La miscelazione delle nanostrutture PZT con polvere*

*di marmo e sabbia ha evidenziato che le proprietà piezoelettriche vengono mantenute anche quando il materiale attivo è presente in piccola percentuale. La caratterizzazione del prodotto finale, sia in fase pura che in miscela con altri componenti o in dispersione a base acquosa ha permesso di approfondire la conoscenza della morfologia e delle principali proprietà dinamiche delle nanoparticelle. Alcune delle misure effettuate sono il frutto di una consolidata collaborazione con due centri di ricerca industriale (Centerbel, Belgio e BGPolymer, Israele), e si riferiscono alla disperdibilità dei nanomateriali in dispersioni acquose contenenti opportuni tensioattivi e alle misure PIXE.*

*Il candidato ha proseguito l'attività di ricerca in modo accurato e autonomo, dovendo affrontare spesso problematiche sperimentali completamente innovative rispetto al proprio background culturale, e conseguendo notevoli successi.*

*Per l'impegno profuso e i risultati sperimentali conseguiti da Lorenzo Tattini nel corso dei tre anni in cui si è articolato il Dottorato di Ricerca, ritengo che il candidato meriti pienamente di conseguire il titolo di Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche.*

Pertanto il dottorando

è ammesso alla Prova Finale con soddisfazione del Collegio dei Docenti

#### 17. **TIBERI Caterina**

Titolo Tesi: Novel enantioselective methodologies for the synthesis of chiral compounds. Catalytic and stoichiometric processes.

Tutore: Prof. Alessandro Degl'Innocenti

- a) presenta 6 lavori;
- b) 10 comunicazioni a congressi;
- c) ha seguito un numero sufficiente di seminari;
- d) ha seguito i 4 corsi organizzati dal CD e ha partecipato al test di valutazione relativo superandolo con 16/20.
- e) La commissione ha ricevuto la seguente relazione dal tutore:

*Nell'ambito del Dottorato di Ricerca, la dott.ssa Tiberi si è interessata sostanzialmente dello sviluppo di metodologie sintetiche innovative, con carattere di regio- e stereoselettività, mediate da organosilani.*

*Tutte le ricerche effettuate dalla dr.ssa Tiberi sono state caratterizzate da assoluto rigore scientifico, alta riproducibilità dei dati sperimentali a testimonianza di un impegno continuo, di una completa autonomia di ricerca e di un lavoro svolto con entusiasmo e profondo interesse, dimostrando un' elevata capacità sia di sviluppo delle tematiche oggetto dello studio, sia di progettazione di nuove possibili strategie sintetiche di accesso a molecole polifunzionali, dimostrando successivamente anche la loro applicabilità per l'ottenimento di composti più complessi a carattere applicativo.*

*Va inoltre menzionato come nello svolgimento delle problematiche di ricerca, la dottoranda abbia sempre dimostrato una profonda conoscenza sia delle metodologie sintetiche più innovative che di acquisizione della cultura chimica specifica, relativa alla ricerca svolta.*

*I risultati ottenuti dalla dott.ssa. Tiberi, e riassunti nella tesi di dottorato, sono stati oggetto sia di diverse pubblicazioni su riviste internazionali, sia di relazioni che la stessa ha presentato personalmente a congressi nazionali ed internazionali del settore.*

*Nell'ultimo anno di dottorato, la dott.ssa Tiberi ha trascorso un periodo di formazione (8 mesi) presso il laboratorio del prof. Jorgensen, Center for Catalysis, Department of Chemistry, Aarhus University (Denmark), dove si è interessata con successo a reazioni stereo controllate di organo catalisi.*

*Sulla base di queste premesse il giudizio complessivo relativo alla ricerca svolta dalla dott.ssa Tiberi è altamente positivo, e ritengo che la stessa sia pienamente meritevole di sostenere l'esame finale di Dottorato in Scienze Chimiche.*

Pertanto il dottorando

è ammesso alla Prova Finale con ampia soddisfazione del Collegio dei Docenti

#### 18. **TROGU Elena**

Titolo Tesi: Synthesis of Isoxazole Derivatives by Catalytic Condensation of Primary Nitro Compounds with Dipolarophiles

Tutore: Prof. Francesco De Sarlo

Cotutore: Dr. Fabrizio Machetti (ricercatore CNR, ICCOM)

a) presenta 3 lavori pubblicati;

b) 11 comunicazioni a congressi;

c) ha seguito un numero sufficiente di seminari;

d) ha seguito i 4 corsi organizzati dal CD e ha partecipato al test di valutazione relativo superandolo con 16/20.

e) La commissione ha ricevuto la seguente relazione dal tutore:

*Elena Trogu si è inserita rapidamente nel gruppo di ricerca che già operava sull'argomento della sua tesi. In precedenza (tesi Luca Cecchi, XIX ciclo) era stata studiata la reazione di nitrocomposti primari con dipolarofili in presenza di una base organica per dare i corrispondenti derivati isossazolici.*

*Nel corso del primo anno la Trogu ha dimostrato che la reazione suddetta avviene con ottimi risultati con quantità catalitiche di base: questo processo di condensazione viene reso così ancora più attraente dal punto di vista della compatibilità ambientale [1]. Tentativi di rendere la reazione enantioselettiva con l'impiego di leganti chirali per il rame hanno dato risultati non incoraggianti.*

*Nel secondo anno la Dottoranda ha studiato la reazione fra nitroacetato di etile e dipolarofili elettron-poveri: le condizioni di reazione e la scelta del sistema catalitico permettono di modulare la selettività verso la cicloaddizione-condensazione oppure l'addizione coniugata, tipo Michael [2].*

*Nel terzo anno la Dottoranda si è dedicata all'estensione a dipolarofili enolizzabili del metodo di condensazione catalitica a derivati isossazolici. Dal benzoilnitrometano, in assenza di altri dipolarofili, viene osservata l'autocondensazione o a fuossano o ad un suo isomero, 3-benzoil-5-fenil-4-nitroisossazolo [3]. Infine la ricerca tuttora in corso riguarda la realizzazione di questi processi di cicloaddizione-condensazione in presenza di acqua (in water o on water). I risultati sono molto promettenti e vengono descritti nell'ultimo capitolo della tesi.*

*La Trogu ha lavorato con assiduità e competenza ed ha presentato periodicamente le relazioni sull'attività svolta, partecipando attivamente alle discussioni oltre che all'attività sperimentale. I risultati sono significativi come dimostra la loro pubblicazione su periodici di elevato prestigio internazionale.*

#### *Pubblicazioni*

[1] F. Machetti, L. Cecchi, E. Trogu, F. De Sarlo, *Eur. J. Org. Chem.*, 2007, 4352-4359.

[2] E. Trogu, F. De Sarlo, F. Machetti, *Chem. Eur. J.* 2009, 15, 7940-7948

[3] E. Trogu, L. Cecchi, F. De Sarlo, L. Guideri, F. Ponticelli, F. Machetti, *Eur. J. Org. Chem.*, 2009, 5971-5978

Pertanto il dottorando

è ammesso alla Prova Finale con ampia soddisfazione del Collegio dei Docenti

## 19. SIRIGU SERENA

Titolo Tesi: Preparation and Characterization of Pharmaceutical Targets Involved in Transcription Regulation, Namely Hormone Nuclear Receptors and Associated Cofactors

Tutore: Ivano Bertini

Nota: dottoranda XXI Ciclo in Cotutela

a) 1 lavoro in preparazione;

b) 1 comunicazione;

c) corsi

d) ha seguito i 4 corsi organizzati dal CD e ha partecipato al test di valutazione relativo superandolo con 11/20.

e) La commissione ha ricevuto la seguente relazione dal tutore:

*The research activity of Serena Sirigu was performed in collaboration with the Louis Pasteur University of Strasbourg.*



*During her PhD Serena acquired an excellent and deep expertise in gene cloning, expression and purification, from the bacterial host E. coli, of natural and isotope-enriched proteins for X-ray crystallography and NMR structural studies.*

*She has cloned, expressed and purified the ligand binding domain (LBD) of retinoic acid receptors such as the hRAR $\gamma$ , hRAR $\gamma$  S371E, hRAR $\alpha$ , hRAR $\alpha$ S369E and the retinoid X receptor hRXR $\alpha$ . She expressed and purified the c-AMP dependent protein kinase PKA and the human Cyclin H both involved in the phosphorylation of the receptor at different domains. Serena has also acquired expertise of cloning, expressing and purifying proteins from cyanobacteria Anabaena.*

*Serena gained a good experience in protein biophysical characterization of the purified proteins by dynamic light scattering, UV-vis, NMR and Surface Plasmon Resonance.*

*Serena has acquired excellent skills in protein crystallisation. She has crystallised the ligand binding domain of the human RAR $\gamma$  S371E and deeply involved in the X-ray Crystallography structure resolution of hRAR $\gamma$  S371E in complex with the ligand 9-cis retinoic acid.*

*She has also been profoundly involved in the study of hRAR $\alpha$  and RAR $\alpha$ S369E (LBD) mobility by NMR. The manuscript integrating crystallography data and dynamic studies, performed in collaboration, is in preparation. Her scientific personality and versatility have grown in the way expected from a PhD student. Her integration in the research group is very good, and her dedication and enthusiasm are outstanding. The research activity as a whole is judged good.*

Pertanto il dottorando

è ammesso alla Prova Finale