

Strutturistica Chimica Sperimentale e Teorica

Prof. D. Viterbo, Dr. M. Milanesio, Dr. Gianluca Croce

Via Bellini 25/G, 15100 Alessandria Tel: 0131-287414 FAX: 0131-287416

Mail: davide.viterbo@mfn.unipmn.it, marco.milanesio@mfn.unipmn.it

Definizione delle aree di ricerca

Parole Chiave: Diffrazione di Raggi X da polveri e da cristallo singolo, Calcolo Teorico, Materiali Zeolitici, Cristalli Molecolari, Sistemi Misti Organico-Inorganico

Descrizione dell'attività di ricerca

L'attività di ricerca si svolge nel campo della determinazione strutturale di sistemi molecolari e materiali cristallini, utilizzando sia tecniche sperimentali che metodi di tipo computazionale. La principale metodologia sperimentale d'indagine strutturale impiegata è la diffrazione a raggi X da cristallo singolo e da polveri, utilizzando sia sorgenti convenzionali che luce di sincrotrone, a seconda del tipo di problematica affrontata. A questi metodi sperimentali sono stati affiancati approcci teorici sia di tipo classico (meccanica e dinamica molecolare) che quantomeccanico (a livello semiempirico ed ab initio). I risultati di tali indagini sono stati, successivamente, confrontati con i dati di tipo cristallografico e spettroscopico disponibili in letteratura, facendo ampio uso delle banche dati di tipo cristallografico. Inoltre sono state ampiamente utilizzate anche le tecniche di calcolo e di grafica molecolare per il modeling di sistemi chimici.

Queste tecniche sono applicate allo studio strutturale e conformazionale di 1) molecole di interesse biofarmacologico e biomedicale, con il fine di capire le relazioni tra struttura e attività in soluzione ed in vivo, dove esse svolgono la loro azione e 2) allo studio di materiali, allo scopo di determinarne accuratamente la struttura allo stato solido e a correlarla alle loro proprietà chimico-fisiche e catalitiche.

Pubblicazioni piu' significative

- 1) Milanesio, M., Ugliengo, P., Viterbo, D., Appendino, G., Ab Initio Conformational Study of the Phenylisoserine Side Chain of Paclitaxel - *J. Med. Chem.*, **42**, 1999, 291-299. Milanesio,
- 2) P. J. De Clercq, Sheng-Ze Zhou, M. Sey, D. Viterbo – A model for the non enzymatic BCD cyclization of Squalene - *Angew. Chemie, Int. Ed. Engl.*, **39**, 2000, 2861-2863.
- 3) Aime S, Diana E, Gobetto R, Milanesio M, Valls E, Viterbo D., Structural and spectroscopic study of the dihydrogen bond in an imine trisium comple - *Organometallics*, **21 (1)**, 2002, 50-5
- 4) Milanesio M, Artioli G, Gualtieri AF, Palin L, Lamberti C., Template burning inside TS-1 and Fe-MFI molecular sieves: An in situ XRPD study, *J. Am. Chem. Soc.*, **125(47)**, 2003, 14549-14558.
- 5) Croce G., Frache A., Milanesio M., Marchese L., Causà M., Viterbo D., Barbaglia A., Bolis V., Bavestrello G., Cerrano C., Benatti U., Pozzolini M., Giovine M., Amenitsch H., Structural characterization of spicules from marine sponges, *Biophys. J.*, **86(1)**, 2004, 526-534..

Strumentazione utilizzata per l'attività di ricerca

- 1) Diffratometro di raggi X da cristallo singolo; 2) Diffratometro di raggi X da polveri;
- 3) Possibilità di accedere a diffrattometri da polveri, da cristallo singolo e per la diffusione ai bassi angoli (SAXS) che fanno uso di sorgenti non convenzionali (sincrotroni); 4) Calcolatori per gli studi computazionali e software di interesse chimico (Jaguar, Gaussian, Macromodel, QSite, Crystal)

Attività conto terzi

Studi diffrattometrici da raggi X da polveri e da cristallo singolo.

Competenze didattiche

Chimica Fisica di base, ambientale e dei materiali. Teoria e pratica della diffrazioni di raggi X da polveri e cristallo singolo. Metodologie di modeling di sistemi chimici e tecniche di ricerca nei database di tipo strutturale (Cambridge Structural Database, Protein Data Bank, Inorganic Structural database)