

L'ambiente e i beni culturali

di Nicola Cardellicchio, Corrado Sarzanini

Il XXI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana dello scorso giugno 2003, ha rappresentato un momento storico per la Divisione di Chimica Ambientale che si è fusa con il Gruppo Interdivisionale di Chimica per i Beni Culturali (Chi.Be.C) per costituire la Divisione di "Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali". L'elevato contenuto scientifico delle comunicazioni presentate al Convegno della Divisione di Chimica Ambientale (150 ricercatori, 120 contributi) ha ribadito l'interdisciplinarietà della ricerca in tale settore ed il valore sociale ed etico della Chimica.

Il XXI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, svoltosi a Torino lo scorso giugno 2003, ha segnato una svolta importante per la Divisione di Chimica Ambientale: in questa occasione, infatti, si è concretizzato il disegno di fusione con il Gruppo Interdivisionale di Chimica per i Beni Culturali (Chi.Be.C) per la costituzione della Divisione di "Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali".

Questa scelta, al di là delle varie opportunità di aggregazione, ha avuto profonde motivazioni culturali: l'accostamento tra ambiente e beni culturali, infatti, esalta ancora di più il valore "sociale" ed "etico" della Chimica, che le celebrazioni di Torino del centenario della nascita di Giulio Natta hanno posto in risalto.

L'ambiente, insomma, come valore da salvaguardare e valorizzare nel presente e per le generazioni future, soprattutto con il razionale sfruttamento delle risorse, frutto dell'evoluzione della natura e degli equilibri tra i vari sistemi abiotici e biotici. Analogamente i "Beni Culturali" sono testimonianza dell'ingegno dell'uomo rivolto alla cultura del "bello" e dell'armonia della natura.

La "questione ambientale"

La visione della Chimica come disciplina fondamentale per lo studio e la conservazione dell'ambiente e dei beni culturali conferisce alla stessa un'intensa immagine positiva, dopo le tante catastrofi ambientali, i fenomeni di inquinamento e l'idea comune nell'immaginario collettivo di una Chimica sinonimo di pericolo da evitare. Per valutare appieno il rapporto e gli stretti legami tra ambiente e beni culturali basti pensare all'impatto della contaminazione ambientale sia sulla conservazione dei monumenti sia sulla salute umana soprattutto nelle aree urbane.

Diversi eventi negli ultimi decenni hanno posto all'attenzione dell'opinione pubblica il problema della "questione ambientale"; la pubblicazione nel 1962 del libro "Silent Spring" di Rachel Carson relativo agli effetti del bioaccumulo dei pesticidi in organismi viventi,

ebbe, ad esempio, un notevole effetto sull'opinione pubblica mondiale. Altri eventi, come gli incidenti di Seveso (1976) e di Bhopal (1984), la previsione di effetti planetari catastrofici legati all'effetto serra, al buco dell'ozono e alla globalizzazione della contaminazione contribuirono ad oscurare l'immagine della Chimica, nonostante che nel periodo tra il 1975-2000 la Chimica avesse dato un notevole contributo anche alla comprensione di processi complessi relativi a sistemi biologici (Chimica supramolecolare, combinatoriale e computazionale). Proprio nell'ambito della Chimica supramolecolare, Jean-Marie Lehn aveva definito nuove linee di ricerche, inquadrando in una Chimica giustamente denominata della "complessità". Nelle problematiche ambientali la Chimica riscopre l'essenza di Scienza chiave per lo studio della reattività degli ecosistemi: è ormai lontano il concetto di una Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali basata esclusivamente sull'analisi di matrici ambientali o manufatti di interesse storico-artistico.

La Chimica, come Scienza, è comprensione dei meccanismi di reazione a tutti i livelli e come tale è in grado di fornire indicazioni sui parametri e sui fenomeni che influenzano la reattività. In relazione, infatti, a tematiche complesse, come la definizione dei cicli biogeochimici degli elementi su scala planetaria, la bonifica dei siti contaminati, la valutazione di impatto ambientale e l'analisi di rischio, i processi industriali "puliti", la tossicologia ambientale, la gestione territoriale delle risorse, il riutilizzo di rifiuti e il recupero energetico, lo sviluppo di nuovi materiali, la Chimica dimostra la sua potenzialità interfacciandosi ad altre discipline (in campo biologico, fisico, ingegneristico ecc.). La questione ambientale è ormai un tema prioritario e mette in discussione la visione antropocentrica dei modelli di sviluppo, basati sulla superiorità dell'uomo rispetto alla natura.

Sviluppo sostenibile

La crescente consapevolezza della globalizzazione del rischio ambientale e i limiti dello sviluppo, derivanti dalla limitatezza delle risorse, pongono in rilievo il ruolo della ricerca scientifica per allon-



Luigi Campanella (a destra) dell'Università "La Sapienza" di Roma durante la consegna della medaglia della Divisione per l'anno 2003

N. Cardellicchio, C. Sarzanini, Società Chimica Italiana - Divisione di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali.

tanare le minacce alla sopravvivenza dell'uomo. Il termine "Sviluppo Sostenibile" (Sustainable Development), coniato nel 1987, si basa su un processo nel quale lo sfruttamento delle risorse, l'orientamento dello sviluppo tecnologico e degli investimenti sono in armonia tra di loro ed accrescono le potenzialità presenti e future. La sostenibilità è la condizione per uno sviluppo duraturo che ricostituisca nel tempo le risorse e consenta anche di superare fenomeni di povertà in aree depresse del pianeta, amministrando le risorse con equità sociale e intergenerazionale.

L'idea che le risorse essenziali per mantenere lo stile di vita dei paesi sviluppati potessero esaurirsi nell'arco di qualche generazione ha dato origine ad una nuova attenzione nei confronti di problemi di equità inter-regionale. La Conferenza di Rio (1992), le cui dichiarazioni sono state confermate dalla Conferenza di Kyoto (1997), testimonia la consapevolezza dei problemi ambientali e auspica nuovi modelli di comportamento da parte dei governi del mondo.

pianeta di assorbire inquinanti, limiti demografici, vincoli imposti dalla "carrying capacity" (capacità del pianeta di sostenere la popolazione umana e tutte le altre forme viventi) e, soprattutto, limiti della conoscenza di come questi vincoli influenzano il sistema. Nell'ottica della globalizzazione resta ancora difficile il rapporto tra scienza e componenti politiche e istituzionali.

Questo rapporto deve però essere recuperato per un doveroso rilancio dell'immagine della Chimica. Gli aspetti scientifici della "questione ambientale" cozzano spesso con la "politica" e gli interessi economici; soprattutto gli interessi in campo industriale sono quelli che hanno danneggiato nel tempo l'immagine della Chimica agli occhi del cittadino. Basti pensare al processo di spostamento di impianti produttivi verso aree dove, oltre a bassi costi del lavoro, vi sono anche bassi livelli di controllo e protezione ambientale. L'esportazione di rifiuti tossici nei paesi in via di sviluppo è anche un caso eclatante.

La Chimica dei Beni Culturali nel 2003: dall'archeologia all'arte moderna

Nell'ambito del Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana si è svolto il II Convegno del Chi-BeC che ha visto impegnati per quattro giorni numerosi studiosi che hanno dato vita a vivaci discussioni durante le sessioni orali e poster. Tutte le relazioni sono state seguite con interesse dai partecipanti al Congresso presenti sempre in gran numero alle attività scientifiche.

Nella sessione congiunta con la Divisione di Chimica dell'Ambiente, la relazione plenaria del prof. Peter Brimblecombe (School of Environmental Sciences, University of East Anglia, Norwich) ha fornito un quadro delle conoscenze attuali sugli effetti delle condizioni ambientali sulle

opere d'arte collocate all'interno ed all'esterno, considerando i complessi effetti sinergici di clima, inquinanti, fattori biologici e focalizzando l'attenzione sulla crescente importanza della "conservazione preventiva" come approccio alla valorizzazione ed alla conservazione dei beni culturali. Argomenti che sono stati ripresi e discussi nelle successive comunicazioni e nella tavola rotonda che ha concluso la giornata. Ne emerge che la chimica dell'atmosfera, sia in ambiente esterno sia interno, e la chimica delle reazioni all'interfaccia superficie "artistica"/atmosfera sono estremamente importanti per capire la cinetica e la termodinamica di questi sistemi: la

conoscenza dei meccanismi di danno porta a prendere decisioni sul livello e la frequenza degli interventi di restauro. Pertanto, in un campo dove la nozione dell'apprezzamento estetico è predominante, la chimica si impone come un mezzo di grande rilevanza.

Gli argomenti trattati nelle varie sessioni del Convegno hanno toccato le diverse problematiche della diagnostica e conservazione dei beni culturali. Sono stati presentati lavori innovativi riguardanti la caratterizzazione di reperti archeologici e manufatti artistici di diverse epoche storiche: oggetto di discussione sono stati ceramiche, affreschi, vetri, legni, pergamene, car-

ta, dipinti murali e su tavola. Il livello di implementazione raggiunto nelle strumentazioni analitiche e la combinazione di tecniche non invasive e di campionamenti mirati permette di ottenere una sempre più completa caratterizzazione chimica dei materiali che costituiscono l'oggetto artistico. L'applicazione di nuove tecniche strumentali quali la spettroscopia micro-Raman, o di quelle più tradizionali come la spettroscopia fotoacustica infrarossa, la microscopia elettronica a scansione con sonda EDX o la gascromatografia accoppiata alla spettrometria di massa mette in risalto quanto sia cruciale la ricerca nella scienza della conservazione,

Dieci anni dopo, la Conferenza di Johannesburg (2002) ha fatto un bilancio degli effetti ambientali di un decennio di globalizzazione economica. Da Rio è emersa la preoccupazione sulle conseguenze planetarie dell'inquinamento degli ecosistemi prodotto dall'uso delle risorse secondo l'attuale stile di vita, affermando da un lato la necessità di un governo globale delle questioni ambientali globali (effetto serra, acidificazione, riduzione dello strato di ozono, desertificazione, tutela della biodiversità), dall'altro l'integrazione degli obiettivi di tutela delle risorse e della qualità dell'ambiente sia nelle politiche territoriali nazionali sia nelle strategie produttive dei gruppi economici. Obiettivi come la riduzione del carico di inquinanti a livello globale, il razionale sfruttamento delle risorse, la riduzione del volume dei rifiuti e la definizione di nuove regole per un'adeguata protezione ambientale devono vedere oggi la Chimica Ambientale protagonista nello scenario mondiale.

Sviluppo sostenibile significa, quindi, investire nel capitale naturale e nella ricerca scientifica per comprendere i processi che sono alla base della "sostenibilità della biosfera". Un aspetto chiave dove la Chimica esprime appieno le sue potenzialità è lo studio del ruolo dei vincoli da cui dipende la corretta impostazione di uno sviluppo sostenibile; vincoli termodinamici, limiti di risorse naturali, limiti del

Ambiente e interdisciplinarietà

La ricerca in campo ambientale dimostra la necessità dell'interdisciplinarietà: nel settore del controllo ambientale, ad esempio, è ormai riduttivo distinguere tra monitoraggio "chimico" e "biologico". Lo studio della diffusione degli inquinanti negli ecosistemi è necessariamente correlato alla valutazione del bioaccumulo in organismi indicatori, alle reazioni di degradazione e biosintesi di contaminanti, alla definizione di effetti tossici sia a breve sia a lungo termine. È questa ormai la nuova frontiera della Chimica dell'Ambiente, finalizzata all'analisi di rischio e alla definizione degli "indici di qualità". Il discorso scientifico si sposta in campo ambientale continuamente dall'abiotico al biotico in una serie di interrelazioni che vedono la Chimica coinvolta nello studio della reattività nei sistemi biologici e dell'influenza delle condizioni ambientali su parametri morfologici e fisiologici sia a livello di singolo individuo sia di popolazione (alterazioni di parametri demografici e strutturali delle comunità, riduzione della biodiversità ecc.).

Sia i sistemi naturali sia quelli sociali ed economici sono sistemi adattativi complessi ovvero sono sistemi in grado di acquisire informazioni sull'ambiente che li circonda e sulle proprie interazioni con

l'ambiente stesso. La teoria dei sistemi adattativi complessi propone oggi una visione del mondo estremamente dinamica, flessibile, e appunto adattativa. Per comprendere le sfide con le quali l'umanità deve confrontarsi sono necessari dunque nuovi strumenti di analisi per la comprensione dei cambiamenti globali e dei legami tra sistemi ecologici, sociali ed economici, al fine di indirizzare politiche innovative per il futuro.

Valutare ed analizzare la "sostenibilità" richiede quindi nuovi modi di pensare. Le precedenti visioni della natura e della società come sistemi vicini all'equilibrio sono state rimpiazzate da visioni dinamiche che enfatizzano le complesse relazioni non lineari, i continui mutamenti, la flessibilità, l'adattabilità, l'apprendimento.

In questo contesto il ruolo della Chimica, e della Chimica ambientale in particolare, è quello di contribuire a costruire conoscenza per mantenere la resilienza (capacità dei sistemi naturali di assorbire gli shock mantenendo le proprie funzioni) dei sistemi naturali ed

in quanto fornisce gli strumenti per individuare i meccanismi di degrado in corso, le loro cause ed il loro stato di avanzamento. Un altro settore di ricerca in costante sviluppo è la messa a punto di nuovi materiali per il consolidamento e la protezione. Un particolare interesse hanno suscitato i nuovi materiali - nanomateriali inorganici e polimeri nanostrutturati - presentati per il consolidamento dei supporti, e le nuove metodologie di polimerizzazione *in situ* per il consolidamento di carta, legno e materiali lapidei. Visto l'interesse e la qualità dei lavori presentati gli autori sono stati invitati a pubblicare il loro contributo su *Science and Technology of Cultural Heritage* che con il volume

11/1-2 (2002) presenterà una rassegna dedicata specificatamente al 2° Convegno Chibec.

Colgo, infine, l'occasione per ringraziare il Comitato Organizzatore di SCI 2003 che ha permesso lo svolgimento delle attività scientifiche del ChiBeC e il Prof. Piero Miri che si è dedicato instancabilmente al successo del nostro Convegno.

Ringrazio, inoltre, tutti i soci del ChiBeC che con la loro attiva partecipazione hanno dato voce a questo gruppo e mi auguro che tale vivacità scientifica possa essere portata a livelli sempre più alti con la nascente Divisione di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali.

Maria Perla Colombini

umani abbassando il livello di vulnerabilità dei sistemi ambientali stessi. Gli ecosistemi hanno più di uno stato di equilibrio e dopo una perturbazione spesso ripristinano un equilibrio differente dal precedente. La figura del Chimico nel settore dell'Ambiente e dei Beni Culturali deve essere dunque oggi estremamente poliedrica e flessibile, per tradurre le conoscenze scientifiche in strumenti di programmazione per lo sviluppo sociale.

Il Congresso della Divisione

Proprio nel contesto dei principi sopraenunciati si sono svolti i lavori del Congresso della Divisione di Chimica Ambientale, nell'ambito del XXI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, che ha visto la partecipazione di oltre 150 ricercatori con oltre 120 contributi scientifici.

Le due plenary lectures di apertura: "Persistent Organic Pollutants: The European Cut of the Whole World Problem" e "Il rapporto fra ambiente e beni culturali: il contributo del chimico ad una doppia sfida in difesa del nostro patrimonio naturalistico ed archeologico", tenute da Valery Petrosyan della M.V. Lomonosov Moscow State

University di Mosca e da Luigi Campanella dell'Università "La Sapienza" di Roma (insigniti entrambi della medaglia della Divisione per l'anno 2003) hanno chiaramente sottolineato due degli aspetti del problema ambientale: inquinamento ed intervento codificato. Tali lectures sono state integrate, per l'aspetto della contaminazione ambientale, con importanti relazioni su valutazione del carico inquinante in impianti di incenerimento, biodisponibilità di contaminanti e rischio ambientale nella decontaminazione di suoli.

Le tematiche affrontate nelle varie sessioni del Congresso: "Fonti di inquinamento e diffusione degli inquinanti", "Mobilità degli inquinanti e trattamento dei reflui", "Chimica ambientale e scienza delle separazioni", "Tecniche analitiche nell'analisi ambientale", "Chimica dei beni culturali", "Biomonitoraggio e rischio ambientale", sono state sviluppate con interessanti comunicazioni che hanno confermato l'interdisciplinarietà della ricerca in tali settori ed il ruolo fondamentale giocato dalla Chimica.



Valery Petrosyan (a destra) dell'Università M.V. Lomonosov di Mosca durante la consegna della medaglia della Divisione per l'anno 2003

Le plenary lectures di Boguslaw Buszewski dell'University di Torun (Polonia) "Chemically Immobilized Surfaces for Separation of Biologically Important Compounds" e di Anpo Masakazu dell'Osaka Prefecture University di Osaka (Giappone) "New Trends in the Design and Development of Second-generation TiO₂ Photocatalysts" hanno rimarcato come il connubio tra scienza e tecnologia abbia portato allo sviluppo di nuovi materiali con specifiche proprietà strutturali, atti rispettivamente al controllo ed all'abbattimento dell'inquinamento, con un rilevante contributo della Chimica nello sviluppo delle nanotecnologie.

Infine la sessione della "Chimica dei Beni Culturali" che, come rimarcato all'inizio, ha rappresentato la concretizzazione di tanto lavoro svolto in questi anni con la costituzione della Divisione di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturali, ha ospitato, in apertura la plenary lecture di Peter Brimblecombe della School of Environmental Sciences di Norwich (UK) "Chemistry and Sustaining Cultural Heritage". Un richiamo all'importanza del controllo e della conservazione e di come la Chimica sia uno strumento di grande importanza pratica in un settore dove è apparso spesso come dominante il concetto di apprezzamento estetico.

Attualità e prospettive della Chimica analitica

di Maria Carla Gennaro

La Divisione di Chimica Analitica ha svolto nel 2003 un'intensa attività culturale e promozionale sia attraverso una fattiva partecipazione ai lavori del XXI Congresso Nazionale della Sci, nel quale ha promosso/aderito ad una serie di iniziative anche interdisciplinari, sia attraverso l'organizzazione di seminari, scuole e convegni in diverse sedi nazionali.

Per la promozione e l'organizzazione delle proprie attività la Divisione si è da tempo strutturata in "gruppi tematici", coordinati da soci della Divisione, indicati da un'assemblea degli aderenti ai gruppi e nominati dal Consiglio Direttivo. Particolarmente significativa è la partecipazione della Divisione alle attività dei Gruppi Interdivisionali, nonché del Consorzio CIMAQ, attraverso sponsorizzazione e supporto di varia natura. Tradizionalmente la Divisione di Chimica Analitica esplica la sua attività attraverso l'organizzazione di:

- un Congresso Nazionale, con cadenza annuale;
- seminari, scuole e corsi promossi da Gruppi ufficialmente costituiti al suo interno su tematiche disciplinari specifiche (ambiente ed alimenti, bioanalitica, chemiometria, elettroanalitica, spettroscopia analitica);
- una Scuola Nazionale per Dottorandi (SNAD).

Essa, inoltre, patrocina e supporta (soprattutto mettendo a disposizione i Docenti) l'attività del Consorzio Interuniversitario di Ricerca "Metodologie Analitiche e Controllo di Qualità (CIMAQ)" e quella di Gruppi Interdivisionali.

Nello specifico, nel 2003, il congresso nazionale è confluito, come per le altre Divisioni, nel Convegno Nazionale della Sci; allo stesso modo anche i gruppi hanno organizzato la propria attività all'interno di tale Convegno, con l'intento di stimolare la più ampia partecipazione alle iniziative interdisciplinari ivi promosse.

In aggiunta a ciò il gruppo di Chemiometria nel 2003:

- a) ha organizzato un "Ciclo di Conferenze" - Genova, 9 aprile 2003
 - a1) Tormod Naes, University of Oslo, "Handling unwanted raw material variation in industry by statistical methods";
 - a2) Erik Bolviken, University of Oslo, "Stochastic simulation and empirical modelling: How statistics is changing";
- b) ha sponsorizzato il Colloquium Mediterraneum V, organizzato dalla Società Italiana di Chemiometria, Ustica, 25-27 giugno 2003. Il Congresso si è svolto malauguratamente in concomitanza con il Congresso Nazionale della Sci, che è stato annunciato quando era ormai fissata e non più modificabile la data del Colloquium. Ciò ha inevitabilmente comportato una ridotta, se pur qualitativamente apprezzabile, partecipazione italiana a quest'ultimo: sette comunicazioni orali e dodici poster su di un totale di sette conferenze plenarie, venticinque comunicazioni orali e cinquantadue poster.



Foto di gruppo della Scuola SNAD

Accanto a queste attività *collettive* vi sono state alcune attività dei *singoli soci* ma con interesse generale. Marco Calderisi ha creato un sito Internet www.chemiometria.it che ha già ora un contenuto interessante, ma che potrebbe diventare il sito ufficiale del gruppo di Chemiometria. M. Forina ha organizzato in Genova e in Logroño (Rioja, Spagna) due scuole di Chemiometria mediante il package PARVUS. Riccardo Leardi ha condotto in Genova una scuola di Disegno sperimentale.

La seconda edizione della Scuola Nazionale di Chimica Analitica (SNAD)

Questa Scuola si è svolta a Bertinoro (FO), presso il Centro Residenziale dell'Università di Bologna. La Scuola è organizzata e coordinata da Marco Taddia dell'Università di Bologna, affiancato da un Comitato Scientifico appositamente costituito. Rivolta principalmente ai Dottorandi che fanno capo a questa disciplina, si propone di fornire loro una preparazione comune ed omogenea a livello avanzato, oltre a quella specifica acquisita presso la sede di provenienza. Ciò implica sia l'approfondimento degli argomenti alla base dell'elaborazione di qualunque processo analitico, sia l'aggiornamento rivolto alle principali innovazioni metodologiche e strumentali per la risoluzione di problemi reali. La Scuola si propone altresì di favorire l'incontro di esperienze diverse, l'adozione di un linguaggio comune e la spinta a cooperare tra coloro che nella pratica professionale della ricerca, della produzione e dei servizi svolgeranno attività analoghe. La Scuola è organizzata sulla base di un ciclo biennale, della durata complessiva di circa 60 ore.

M.C. Gennaro, Presidente della Divisione di Chimica Analitica.

L'edizione 2003 ha rappresentato il II anno del I ciclo e vi hanno partecipato 28 allievi. La pagina web della Scuola, all'indirizzo <http://www.ciam.unibo.it/SNAD/2003/index.html>, riporta i loro nominativi e la sede di provenienza. I docenti, provenienti dall'università, da enti di ricerca e dall'industria, erano esperti riconosciuti di chimica analitica o di settori collegati, ed hanno prestato gratuitamente la loro collaborazione.

Si sono tenute lezioni sui seguenti argomenti:

- Attuali prospettive della ricerca in campo analitico - Progettazione, conduzione e sfruttamento dei risultati della ricerca (Roberto Marassi, Università di Camerino)
- Teoria ed applicazioni delle separazioni cromatografiche bi-dimensionali (Maria Chiara Pietrogrande, Università di Ferrara)
- Statistica, normativa e piani di campionamento (Romolo Ciccirelli, Haute Ecole Valaisanne (HEVs), Sion - Svizzera)
- Tecniche elettrochimiche innovative e loro applicazioni analitiche (Renato Seeber, Università di Modena e Reggio Emilia)
- Nuovi metodi di spettrometria atomica basati sulla generazione chimica di derivati volatili (Alessandro D'Ulivo, CNR Istituto processi chimico-fisici, Pisa)
- Criteri generali per l'analisi a livello di tracce - Linee guida per la stesura di un lavoro di argomento analitico (Edoardo Mentasti, Università di Torino)
- Principi, strumentazione ed applicazioni analitiche delle tecniche HPLC-MS e CZE-MS (Marco Vincenti, Università di Torino)
- Tecniche di spettrometria di massa per lo studio del proteoma (Angela Bachi, Dibi-HSR Dipartimento ricerche biotecnologiche, Istituto San Raffaele, Milano)
- La caratterizzazione di piccole molecole sintetiche nei laboratori di ricerca industriale (Vincenzo Rizzo, Pharmacia Italia SpA, Milano)
- Funzioni di calibrazione e procedure di regressione (Roberto Todeschini, Università di Milano Bicocca)
- Metodologie analitiche per la caratterizzazione delle superfici: principi, strumentazione ed applicazioni a sistemi reali (Antonella Rossi, Università di Cagliari)
- Impiego dei sistemi micellari nelle separazioni analitiche: HPLC micellare, elettroforesi capillare micellare (Edmondo Pramauro, Università di Torino)
- I sistemi di gestione delle informazioni di laboratorio (LIMS) (Roberto Tecco, LabSystems Italia Srl, Milano)
- La microestrazione in fase solida nell'analisi alimentare ed ambientale (Francesco Palmisano, Università di Bari)
- Metodologie innovative nell'analisi degli alimenti con tecniche cromatografiche ed elettroforesi capillare (Tommaso Cataldi, Università della Basilicata).

Al termine di ogni giornata era prevista una discussione generale. Un'innovazione rilevante di questa edizione è stata la presentazione dell'attività di ricerca dei partecipanti tramite poster, che sono rimasti esposti per l'intera durata della Scuola e brevemente discussi in un'apposita sessione. Alle due presentazioni più efficaci è stato assegnato un piccolo riconoscimento.

Ai partecipanti alla Scuola è stato rilasciato un attestato e sono state distribuite fotocopie con i testi/riassunti delle lezioni. Al buon andamento della Scuola ha certamente contribuito anche l'efficiente supporto amministrativo del personale della sede romana della Sci.

L'attività del CIMAQ

L'attività del Consorzio Interuniversitario di Ricerca "Metodologie Analitiche e Controllo di Qualità (CIMAQ)" si è sviluppata attraverso l'organizzazione di:

- Corso "ISO/IEC 17025. Validazione dei metodi di prova e incertezza di misurazione" (in collaborazione con SINAL), Parma, 11-12 marzo 2003, con il seguente programma: Norma UNI CEI EN ISO/IEC 17025 e requisiti SINAL; Le procedure per l'accreditamento dei laboratori di analisi chimica secondo il SINAL; Validazione dei metodi di prova; L'incertezza di misurazione nell'analisi chimica. I diversi approcci; Incertezza di misurazione e limiti legali; Determinazione dell'incertezza di misurazione in diversi problemi analitici; Discussione di casi. Il Corso è stato seguito da 105 partecipanti provenienti da Enti, industrie, laboratori privati.

- Corso "Qualità del dato analitico e validazione dei metodi di analisi chimica", Ferrara, 15-16 aprile 2003, con il seguente programma: Calibrazione. Valutazione della linearità (teoria ed esercitazioni); Accuratezza: esattezza e precisione. Valutazione della precisione (teoria ed esercitazioni); Valutazione dell'esattezza. Impiego di materiali di riferimento certificati; Recovery; Limiti di rivelazione e di quantificazione (secondo l'approccio IUPAC e ACS e mediante impiego della retta di calibrazione); Selettività e specificità. Il Corso, essendo previste esercitazioni al computer, è stato chiuso a 30 partecipanti. Esso è stato ripetuto presso l'Università di Parma nei giorni 8 e 9 luglio, visto l'elevato (>60) numero di richieste di partecipazione.

- Corso "Controllo di Qualità", Parma, 10-11 settembre 2003, con il seguente programma: Tecniche di disegno sperimentale; Robustezza; System suitability test; Controllo di qualità interno e campioni di controllo; Carte di controllo. Il Corso, essendo previste esercitazioni al computer, è stato chiuso a n. 24 partecipanti.

Le lezioni nei tre corsi menzionati sono state tenute da esperti del mondo accademico, dell'industria e di enti di ricerca: P. Bianco - Sinal, Roma; B. Brunetti - Università di Milano; E. Desimoni - Università di Milano; F. Dondi - Università di Ferrara; M. Careri - Università degli Studi di Parma; M.C. Gennaro - Università del Piemonte Orientale; A. Maiocchi - Bracco Imaging SpA.; A. Mangia - Università degli Studi di Parma; E. Marengo - Università del Piemonte Orientale; R. Morabito - ENEA, Roma; G. Mori - Università di Parma; L. Pasti - Università di Ferrara.

Attività del Gruppo Interdivisionale di Calorimetria ed Analisi Termica

Il Gruppo Interdivisionale di Calorimetria ed Analisi Termica (GICAT) ha svolto, congiuntamente con l'Associazione Italiana di Calorimetria e Analisi termica (AICAT), attività di promozione e sviluppo della ricerca e della formazione nel campo della Calorimetria e dell'Analisi Termica attraverso l'organizzazione di convegni e workshop, che hanno visto la partecipazione di studiosi italiani e stranieri interessati ai differenti settori sia di base sia applicativi.

L'attività scientifica del GICAT nell'AA 2002-2003 ha avuto come suoi massimi momenti la co-organizzazione del XXIV Convegno Nazionale (Catania 15-18 dicembre 2002) e della VI MEDICTA (Oporto 27-31 luglio 2003). Il Convegno Nazionale, il ventiquattresimo della serie di Congressi con cadenza annuale, organizzato congiuntamente dal Gruppo Interdivisionale di Calorimetria ed Analisi Termica (GICAT, Italia) e dall'Associazione Italiana di Calorimetria ed Analisi Termica (AICAT, Italia), si è svolto presso la sede dell'ex Palazzo delle Scienze dell'Università di Catania ed ha visto la partecipazione di circa 100 ricercatori.

Il Congresso, la cui organizzazione locale è stata curata dagli aderenti dell'Università di Catania, si è articolato in diverse sessioni, riguardanti la termodinamica chimica e delle soluzioni, i materiali polimerici, i materiali inorganici, la food chemistry, la termodinami-

ca dell'ambiente, nuovi metodi e calibrazioni e la biotermodinamica. Ciascuna delle sessioni è stata aperta da una conferenza plenaria tenuta da una persona di spicco nello specifico settore. Le Conferenze plenarie sono state tenute dai Proff. Reed M. Izatt (Brigham Young University, Provo, Utah, USA), Robert E.M. Hedges (Oxford University, UK), Yrjö H. Roos (Department of Food and Nutritional Sciences, University College, Cork, Ireland), Riccardo Ferro (Università di Genova, Italia), Anthony E. Beezer (Medway Sciences, University of Greenwich, UK). Nonostante si trattasse di un Congresso a carattere nazionale, ai lavori hanno partecipato ricercatori stranieri provenienti da dieci diversi Paesi. Al Congresso hanno partecipato anche alcuni ricercatori Spagnoli, Israeliani e Portoghesi, in rappresentanza delle associazioni sorelle del GECAT, IGCAT e CATPOR. Oltre alle *invited lectures*, sono state presentate complessivamente circa trenta comunicazioni orali e 70 *poster*, che si inserivano nelle aree tematiche citate sopra. I lavori scientifici più significativi, sottoposti ad una *peer review*, stanno per essere pubblicati su uno *Special Issue* di *Termochimica Acta*.

Durante il convegno è stato assegnato il premio Lucci, edizione 2002, sponsorizzato dalla famiglia Lucci e dall'AICAT e destinato a giovani ricercatori di età inferiore a 35 anni che si siano distinti per la loro attività di ricerca nel campo della calorimetria e dell'analisi termica. Nell'edizione 2002 è stato vinto ex equo da Maria Laura di Lorenzo (Istituto di Chimica e Tecnologia dei Polimeri, CNR, Napoli) "per il contributo personale di competenza ed innovazione allo sviluppo di tecniche calorimetriche e termoanalitiche applicate alla caratterizzazione di nuovi materiali polimerici" e da Angelo Lunghi (Stazione Sperimentale dei Combustibili, S. Donato Milanese) "per il contributo di competenza ed esperienza apportato mediante l'utilizzo di tecniche calorimetriche e termoanalitiche innovative ad un settore di importanza fondamentale nella chimica, quale quello della sicurezza dei processi industriali".

Il GICAT e l'AICAT hanno patrocinato inoltre il 16° Convegno sulla Calorimetria di Reazione per la Sicurezza e lo Sviluppo dei Processi Chimici svoltosi il 2 e 3 dicembre 2002 presso Stazione Sperimentale dei Combustibili di San Donato Milanese. In seno al XXI Congresso

della Società Chimica Italiana svoltosi a Torino dal 22 al 27 giugno 2003, nell'ambito del Programma dei lavori della Divisione di Chimica Fisica, il GICAT e l'AICAT hanno organizzato il Workshop "Calorimetry and Thermal Analysis for the New Frontiers of Chemistry" nel quale alcuni studiosi italiani e stranieri sono stati invitati a presentare i più recenti risultati ed applicazioni delle loro ricerche in alcuni settori innovativi della ricerca chimica, dalla chimica degli alimenti, alla chimica fisica biologica, alla chimica supramolecolare, al design di nuove molecole di interesse farmacologico.

L'altro momento di particolare interesse ai fini scientifici è stato rappresentato dalla Mediterranean Conference on Calorimetry and Thermal Analysis (MEDICTA). MEDICTA 2003, la sesta Conferenza di questa serie con cadenza biennale, si è svolta ad Oporto, Portogallo, dal 27 al 30 luglio 2003 ed è stata organizzata congiuntamente, secondo la tradizione, dal GICAT, dall'AICAT e dai gruppi nazionali di calorimetria e analisi termica di Grecia, Israele, Spagna e Portogallo. Il congresso ha visto la partecipazione di circa 120 studiosi, provenienti da diversi paesi e interessati alla termodinamica chimica, alle proprietà termiche dei materiali e alle varie tecniche calorimetriche e termoanalitiche. Gli aderenti al GICAT hanno anche avuto la possibilità di accedere ad una delle cinque borse di studio offerte dall'AICAT per sostenere la partecipazione di altrettanti giovani ricercatori a questo convegno.

Infine, nell'ambito dei programmi comunitari, il GICAT e l'AICAT partecipano attraverso il coinvolgimento di alcuni dei propri membri ad un progetto della UE per la costituzione di un Istituto Virtuale di Metrologia Termica (EVITHERM) il cui scopo è di fornire alla comunità scientifica ed al mondo della produzione industriale un rapido e facile accesso a informazioni certificate su proprietà termofisiche e tecniche di misura termiche e calorimetriche. Al progetto partecipano 34 organizzazioni (università, enti di ricerca, istituti di metrologia, laboratori di ricerca industriali) di 12 paesi europei.

Il GICAT e l'AICAT hanno il piacere di sottolineare che uno dei propri membri (G. Della Gatta, Università di Torino) ha ricevuto l'Award della North American Thermal Analysis Society per l'anno 2003, sponsorizzato dalla Mettler-Toledo.

La Chimica farmaceutica nel 2003

di Roberto Pellicciari

La Divisione di Chimica Farmaceutica ha promosso attività congressuali e didattiche rivolte, queste ultime, alla formazione dei ricercatori più giovani. In tutte queste attività ai temi di ricerca tradizionali ne sono stati affiancati altri più innovativi, quali la genomica e l'epigenetica, per prendere atto dell'evoluzione della disciplina.

Il Congresso annuale della Divisione si è svolto nell'ambito del XXI Congresso Nazionale della SCI. Il Congresso è stato articolato in sessioni dedicate a temi di attualità, alternati ad eventi di interesse scientifico e culturale. Nella prima giornata è stata conferita la prima "Medaglia Pratesi" a C. Hansch (Pomona College, USA), il fondatore dello studio quantitativo delle relazioni attività-struttura (QSAR). La sua lettura 'The role of luck in the evolution of QSAR', ha spaziato lungo più di tre decenni di attività di ricerca ed ha fornito una visione personale del progresso intellettuale e sperimentale che ha portato alla definizione teorica del QSAR, delle relazioni lineari di energia libera e a più di 9.000 applicazioni in campo biomedico. Alla presentazione di Hansch, sono seguite quelle di due suoi collaboratori italiani, A. Carotti (Bari) e M. Recanatini (Bolo-

gna) che hanno descritto come le tecniche QSAR, affiancate dalle moderne tecniche computazionali, permettano di affrontare il disegno dei farmaci. La prima sessione si è conclusa con la presentazione di C. De Micheli (Milano) (Proprietà di nuovi derivati dell'acido glutammico a conformazione ristretta).

La seconda sessione, organizzata congiuntamente alla Divisione di Chimica Organica, ha visto le presentazioni di M.N. Romanelli (Firenze) (Sintesi e valutazione farmacologica di analoghi della zatebradina), di P.G. Baraldi (Ferrara) (Sintesi dell'attività biologica di nuovi agonisti e antagonisti dei recettori A_{2B} e A_3 dell'adenosina), di M. Botta (Siena) (Sintesi di nuovi derivati diterpenici quali potenziali antitumorali e inibitori della MDR), di L. Gomez-Paloma (Salerno) (Sintesi dell'inibizione della fosfolipasi A_2), di P. Rovero (Salerno) (Sintesi di peptidi e pseudopeptidi come potenziali agenti antivirali). A queste si sono unite le presentazioni dei relatori dalla Divisione di Chimica Organica.

Le sessioni dei giorni successivi sono state dedicate allo sviluppo di inibitori enzimatici, di farmaci antitumorali e di modulatori recettoriali. La sessione sugli inibitori enzimatici ha visto le presentazioni rispettivamente di A. Mai (Roma) (Inibitori di istone deacetilasi) e di M. Bognesi (Genova) (Caratterizzazione strutturale di BARS, un enzima bifunzionale dell'apparato di Golgi). La sessione è proseguita con le comunicazioni orali di E. Camaioni (Perugia), L. Tarsi (GSK, Verona), S. Cesarini (Genova), R. Morigi (Bologna), P.F. Ioan (Bologna), E. Teodori (Firenze) e A. Tait (Modena).

La sessione dedicata ai farmaci antitumorali ha compreso la presentazione di D. Osella (Novara), (Nuovi composti organometallici quali nuovi agenti antitumorali), di M. Macchia (Pisa) e P. Peverello (Pharmacia, Nerviano) che hanno illustrato i risultati di ricerche nel

Le comunicazioni di B. Asproni (Sassari), di G. Spadoni (Urbino), di A.M. D'Ursi (Salerno), di M. Leopoldo (Università di Bari) e di P. Grieco (Napoli) hanno completato la sessione. Questa penultima giornata del convegno si è chiusa con il conferimento dei premi Farmindustria e l'assemblea generale dei soci della Divisione di Chimica Farmaceutica (DCF).

La seconda edizione del premio Farmindustria ha visto premiati A. Cavalli (Bologna) e G. Costantino (Perugia). I premi sono stati consegnati da M. Agostini, vicepresidente Farmindustria e da R. Pellicciari, Presidente della DCF. Al termine della premiazione i vincitori hanno esposto i loro risultati scientifici più significativi. La giornata conclusiva è stata dedicata ai lavori del Gruppo interdivisionale di Analisi Farmaceutica, presente a Torino con poster e comunicazioni orali riguardanti tematiche quali lo sviluppo di colonne monolitiche Micro-lmers, l'impiego di nanotecnologie in analisi cromatografica ed elettroforetica, l'applicazione del MALDI-TOF-MS nella ricerca farmaceutica, separazione enantiomerica di metaboliti.

Simposi

Ongoing Progress in the Receptor Chemistry

Il simposio "Ongoing Progress in the Receptor Chemistry" è coinciso con la ricorrenza della XXV edizione della serie congiunta Camerino-Noordwijkerhout (XIV edizione italiana).

Il simposio è iniziato con la premiazione di due ricercatori distinti per la qualità delle loro ricerche e per il contributo dato all'organizzazione di questa serie di meeting e cioè il Prof. H. Timmerman

(Libera Università di Amsterdam) ed il Prof. C. Melchiorre (Bologna). Sono seguite le letture di H. Kubinji (Heidelberg) (Aspetti innovativi del Drug Discovery), di F. Hucho (Libera Università di Berlino) (Le tappe della caratterizzazione del recettore nicotinico), di G. Milligan (Glasgow) e R. Maggio (Pisa) che hanno illustrato i processi di omo- ed etero-dimerizzazione dei recettori accoppiati alle proteine. G.S. Alcaro (Catanzaro) ha illustrato nuove metodologie di docking, P. Conti (Milano) ha discusso la sintesi ed il profilo farmacologico di nuovi antagonisti del recettore NMDA, S. Holman (GSK, Stevenage, UK) l'identificazione di antagonisti dell'alfa-4 integrina e L. Piazza (Bologna) la sintesi e lo studio di inibitori dell'acetilcolinesterasi.

Nella successiva sessione si sono avute le lezioni di J.-P. Pin (CNRS, Montpellier) (Composizione e meccanismo di attivazione della famiglia C dei recettori accoppiati alle proteine-G), di

N. Birdsall (National Institut for Medical Research, London) (Esempi di regolazione allosterica di recettori muscarinici ed A_1 adenosinici.), di C. Melchiorre (Bologna) (Versatilità delle poliammidi nel modulare i recettori accoppiati alle proteine-G e le proteine-G). Nella giornata successiva hanno relazionato R. Glennon (Virginia) (Modelli farmacoforici correlati alla nicotina), J. Schmitt (Targacept Inc., Winston-Salem) (Metodologie di computational drug design), L.B. Hough (Albany Medical College) (Proprietà analgesiche di an-



Corwin Hansch, primo vincitore della Medaglia Pratesi, termina la sua relazione al Congresso SCI di Torino

campo rispettivamente di nuovi agenti antiproliferativi e di inibitori specifici di proteine chinasi. Le comunicazioni orali hanno visto il contributo di M. Chinol (Milano), di P.A. Salvadori (Pisa) e di U. Mazzi (Padova). La sessione su recettori ed enzimi come target ha avuto come relatori G. Cristalli (Camerino) (Nuovi modulatori dei recettori purinergici), di M. Mor (Parma) (Nuovi inibitori della FAAH), di G. Ronsisvalle (Catania) (Antagonisti dei recettori sigma) e di A. Gasco (Torino) (Sviluppi recenti di farmaci donatori di NO).

tagonisti dei recettori dell'istamina improprio-simili), P.J. Beswick (GSK, Harlow) (Nuovi agonisti del recettore A_1 adenosinico, come potenziali farmaci analgesici), R. Morphy (Organon Laboratories Ltd., Newhouse) (Un potente inibitore del trasporto della glicina) e J. Neumeyer (Harvard Medical School) (Nuovi farmacofori della morfina). Nella sessione successiva J.R. Atack e A.M. MacLeod (Merck Sharp & Dohme, Essex) si sono soffermati sulle connessioni tra il sito di legame delle benzodiazepine ed il recettore $GABA_A$. D. Nichols (Purdue University) e R. Mailman (University of North Carolina, Chapel Hill) hanno descritto il ruolo degli agonisti dopaminergici nel morbo di Parkinson e nella neuroprotezione, C. Sonesson (Carlsson Research AB, Göteborg) ha presentato nuove fenilpiperidine e analoghi, quali stabilizzatori dopaminergici nel trattamento dei disordini neurologici e psichiatrici, A. Parini (INSERM, Toulouse) ha concluso la sessione parlando del metabolismo delle ammine biogene. Nella sessione di mercoledì si sono avute le lezioni di W. Carroll (Abbott Laboratories, Abbott Park) (Ligandi selettivi α_1 -adrenergici, potenzialmente utili contro lo stress da incontinenza urinaria), di D. Rawson (Pfizer Central Research, Sandwich) (Una nuova serie di antagonisti dei recettori delle endoteline (ET_A) per il trattamento dell'ipertensione).

M. Scheinin (Turku) e H. Paris (INSERM, Toulouse) hanno trattato il ruolo dei recettori α_{2A} , α_{2B} ed α_{2C} adrenergici come target terapeutico. P. Bousquet (INSERM, Strasbourg) ha fornito prove sulla identità dei recettori imidazolinici e sulla loro interazione con gli α_2 -adrenergici, mentre A. Carrieri (Bari) ha presentato uno studio 3D-QSAR su nuovi ligandi dei recettori imidazolinici. In chiusura G. Sagratini (Camerino) ha riportato analoghi del (+)-cyclazosin. La successiva sessione ha visto gli interventi di P. Thomas (Università del Texas, Austin) (Modelli di recettori di membrana), di P. Hermkens (N. V. Organon, Oss) (Identificazione di ligandi del recettore nucleare orfano GCNF) e di S. Karkola (Helsinki) (Disegno di nuovi inibitori dell'aromatasi).

Nell'ultima sessione del simposio si sono avute le relazioni di J. Fischer (Gedeon Richter Ltd., Budapest) (Ruolo degli "analoghi" nella evoluzione dei farmaci), di P. Maurel (INSERM, Montpellier) (Metabolismo e tossicità degli xenobiotici), di T.A. Egorova-Zachernyuk (Protein Labelling Innovation, Leiden) (Applicazioni della Risonanza Magnetica Nucleare allo Stato Solido (SS NMR) nelle interazioni ligando-proteina). D.J. Triggle (State University of New York, Buffalo) ha chiuso il simposio, con una panoramica sulla situazione internazionale della ricerca farmaceutica.

Medicinal Chemistry and Pharmacology of Purinergic Receptors

Il simposio satellite "Medicinal Chemistry and Pharmacology of Purinergic Receptors", organizzato da G. Cristalli, S. Vittori e R. Volpini, si è articolato in otto sessioni, per un totale di 11 relazioni su invito, 16 comunicazioni brevi e numerosi poster, più una tavola rotonda. Nella prima sessione si sono avute le relazioni di C. Müller (Bonn) (Rassegna sui ligandi dei recettori P1 e P2) di K.-N. Klotz (Würzburg) (SAR di derivati purinici come antagonisti P1), di P. Van Rompaey (Gent) (Analoghi adenosinici ipermodificati). La sessione seguente ha compreso le lezioni di H. Zimmermann (Francoforte) (Metabolismo extracellulare dei nucleotidi), di F. Caciagli (Chieti) (Funzioni dell'ecto-PNP su cellule neurali), di C. Verderio (Milano) (Rilascio di ATP nelle interazioni tra microglia ed astrociti), di S. Ceruti (Milano) (Ruolo della Caspasi-2 nell'apoptosi), di A. Kittel (Budapest) (Espressione di enzimi fosfolipolitici in ghiandole di topo). La successiva sessione ha visto le relazioni di A. Ijzerman (Leiden) (Modulazione allosterica del recettore adenosinico

A_1), di J. Zablocki (CVT, Palo Alto) (Agonisti parziali da un punto di vista molecolare), di S. Costanzi (Camerino) (Confronto strutturale dei recettori P2Y basata su analisi di sequenze e su modelling per omologia), di P. Fossa (Genova) (Approccio chemometrico per la predizione dell'affinità recettoriale).

Le relazioni della sessione seguente sono state quelle di M.P. Abbraccio (Milano) (Biologia molecolare e farmacologia dei recettori P2Y), di R. Ciccarelli (Chieti) (Interazioni funzionali tra i recettori A_1 e mGluR3 in astrociti), di E. Klaasse (Leiden) (Internalizzazione del recettore A_1 -YFP) e di G. Reiser (Magdeburg) (Meccanismi di endocitosi del recettore P2Y₂). Hanno relazionato nella quinta sessione M. Morelli (Cagliari) (Recettori P1 nel cervello), M.L. Trincavelli (Pisa) (Regolazione dell'espressione del recettore A_{2B} in cellule astrogliali da parte del TNF α), A.M. Pugliese (Firenze) (Protezione nei confronti di alcune conseguenze dell'ischemia da parte di antagonisti del recettore A_3), P. Di Iorio (Chieti) (Funzione della guanosina come agente neuroprotettivo), di P. Illes (Leipzig) (Recettori P2X e P2Y nel sistema nervoso), di F. Vacca (CNR, Roma) (Localizzazione del recettore P2Y₃ in cellule neuronali), di M. Salter (Toronto) (Mutamenti nella concentrazione di Ca^{++} negli astrociti causati da recettori P2) e di M. Fumagalli (Milano) (Espressione dei recettori purinergici nelle cellule della microglia a seconda del loro stato di attivazione).

Hanno relazionato nell'ultima sessione R. Lasley (Lexington) (Effetti dei recettori adenosinici sul miocardio ventricolare in condizioni normali e sotto stress), M. Cattaneo (Università di Milano) (Recettori P2 nelle piastrine) e G. Yegutkin (Turku) (Adesione di leucociti all'endotelio vascolare e inibizione del turnover purinico extracellulare). La parte scientifica del convegno si è chiusa con la tavola rotonda su "Purinergic Receptor Ligands in Clinical Trials" e G. Cristalli (Camerino) e F. Di Virgilio (Ferrara) hanno presentato una relazione sui ligandi dei recettori P1 e P2 in fase clinica.

Joint Polish Austrian German Hungarian Italian Meeting

L'attività congressuale 2003 si è conclusa con il terzo terzo "Joint Meeting on Medicinal Chemistry" organizzato a Cracovia, dalle Divisioni di Chimica Farmaceutica delle Società Chimiche Polacca, Austriaca, Tedesca, Ungherese ed Italiana.

Alla manifestazione hanno partecipato oltre 350 ricercatori, dei quali oltre cento italiani. Il programma si è articolato in 5 conferenze plenarie 20 lezioni, 8 comunicazioni orali e 221 poster. Il congresso si è aperto con la lettura plenaria di W. Schunack (Libera Università di Berlino) (Proteine G come potenziali target di nuovi farmaci), alla quale è seguita quella di B. Testa (Losanna) (Previsione del metabolismo dei farmaci). Le due successive lezioni sono state tenute da P.P. Liberski (Lodz) (Impiego della proteina prione a scopi terapeutici) e da M. Jaskolski (Poznan) (Rapporto tra 3D domain swapping ed aggregazione amiloide). Le due conferenze plenarie del secondo giorno sono state presentate da J.P. Stables (NIH, USA) (Programma NIH per l'epilessia) e da T.N. Johansen (University of Copenhagen) (Ligandi dei recettori NMDA).

Quest'ultimo argomento è stato trattato in due altre lezioni presentate da A. Chimirri (Messina) e da I. Greiner (Gedeon Richter, Budapest). Nell'ultima lettura plenaria M.G. Blackburn (Sheffield) si è occupato di anticorpi catalitici e drug delivery. Composti ad attività analgesica sono stati discussi da A.W. Lipkowski (Varsavia), da G. Tóth e da F. Fulöp (Szeged). Altri argomenti hanno riguardato composti ad attività antitumorale sui quali hanno relazionato J. Engel (Zentaris AG, Francoforte), E.G. Gunther (Zentaris AG, Francoforte).

te), E. Haaksma (Boehringer Ingelheim, Vienna), G. Hofle (Gesellschaft für Biotechnologische Forschung, Braunschweig), P. Kafarski (Wroclaw) e composti ad attività antivirali per i quali hanno presentato i loro contributi H. Schwalbe (Francoforte), S. Manfredini (Ferrara), M.L. Barreca (Messina). Nuovi sviluppi nel campo dei donatori di NO sono stati presentati dai due relatori italiani A. Gasco (Torino) e L. Grossi (Bologna).

G. Tarzia (Urbino) ha relazionato su nuovi inibitori delle idrolasi di amidi di acidi grassi T. Langer (Innsbruck) ha presentato i suoi studi sull'impiego della virtual combinatorial chemistry ed in silico screening per la scoperta di nuovi lead. Oliver C. Kappe (Graz) e M. Auer (Novartis Forschungsinstitut, Vienna) hanno relazionato su sintesi in fase solida e S. Antus (Debrecen) su sintesi di prodotti presenti in natura. Le letture plenarie e le lezioni saranno pubblicate su un numero di *Pure and Applied Chemistry*.

X Meeting RDPA 2003

L'iniziativa è organizzata dal Gruppo interdivisionale di Analisi Farmaceutiche, che nel 2003 ha organizzato il 10° Meeting, RDPA 2003 (organizzatori: G. Caccialanza e G. Massolini) (Pavia). Il meeting si è articolato in lezioni su invito (L.W. Weiner, USA; J.L. Veuthey, Svizzera; B. Chakvtadze, Germany; M. Chiari, Italia; N.H.H. Heegaard, Danimarca; G. Blaschke, Germania; W. Lindner, Austria; S. Fanali, Italia), comunicazioni libere e numerosi poster. A seguito si è svolto il corso estivo annuale in Analisi Farmaceutica, una scuola internazionale che si svolge ad anni alterni all'isola d'Elba o in congiunzione con il Meeting RDPA. Le lezioni della Scuola permettono un aggiornamento sulle nuove tematiche dell'analisi farmaceutica.

Scuole

Si è svolta ad Urbino (30 giugno-4 luglio 2003) la XXIII edizione del Corso Avanzato di Chimica Farmaceutica e Seminario Nazionale per Dottorandi 'E. Duranti', con la partecipazione di oltre 200 dottorandi, sia italiani sia europei, docenti e relatori. La scuola ha avuto inizio con la lezione di F. Dall'Olio (Bologna) (Ruolo delle glicoproteine e dei glicolipidi in numerosi processi fisiologici). G. Casiraghi (Parma) ha fatto una panoramica sulla chimica dei monosaccaridi e sui loro analoghi, in particolare sulle metodologie sintetiche più avanzate.

M. Hamdan (GSK, Verona) ha discusso dell'importanza della spettrometria di massa per la caratterizzazione strutturale di molecole complesse quali le glicoproteine. M. von Itzstein (Griffith, Australia) ha descritto la progettazione dello Zanamivir, un analogo dell'acido sialico. La sessione si è conclusa con l'intervento di G. Thoma (Novartis, Basilea, Svizzera) che ha trattato la progettazione e la sintesi di glicodendrimeri come potenziali prodotti terapeutici. La seconda sessione è stata introdotta da P. Tundo (Venezia) che ha evidenziato l'esigenza di una chimica compatibile con l'ambiente: "chimica verde" o "chimica sostenibile" e W. Cabri (Antibioticos, Rodano) ha relazionato sulle problematiche che le aziende chimiche devono affrontare per rendere le fasi di ricerca e sviluppo di un prodotto accettabili dal punto di vista della compatibilità ambientale. In chiusura F. Fringuelli (Perugia) ha mostrato numerosi esempi di reazioni chimiche nelle quali l'acqua viene utilizzata come solvente. Nella terza sessione M. Varasi (Pharmacia, Nerviano) ha introdotto le ricerche su inibitori delle proteine-chinasi come farmaci ad attività antitumorale, P. Le Cou-

tre (Berlino) e P.W. Manley (Novartis, Basilea) hanno relazionato sulla scoperta dell'Imatinib, un inibitore delle tirosin chinasi. G. Scapin (Merck, Rahway) ha discusso i più recenti approcci computazionali per la progettazione di inibitori delle protein chinasi. K.H. Gibson (Astra Zeneca, Macclesfield) ha presentato un importante farmaco antitumorale, l'Iressa, inibitore di una protein chinasi. P. Pevarello (Pharmacia, Nerviano) si è soffermato sulla sintesi di molecole in grado di inibire la famiglia delle protein chinasi ciclino-dipendenti (CDKs).

P.W. Howard (University College, Londra) ha concluso la sessione parlando sulla particolare protein chinasi "MET". La quarta sessione della scuola è stata introdotta da R. Pellicciari (Università di Perugia) con una panoramica sulla famiglia dei recettori nucleari, soffermandosi in particolare sul recettore nucleare orfano FXR. D. Moras (IGBMC, Ilkirch) ha discusso i recettori nucleari orfani, R. Tolando (GSK, Verona) ha riportato ricerche sul recettore nucleare PXR. K. Bamberg (Astra Zeneca, Mölndal) ha chiuso la sessione evidenziando il ruolo degli attivatori dei recettori nucleari PPAR. Nella quinta sessione introdotta da G. Roscigno (FIND, Ginevra) è stato affrontato il problema di patologie quali la tubercolosi e la Leishmaniosi. D. Jabes (Vicuron, Gerezano) ha sottolineato come per queste patologie "dimenticate" non si faccia sufficiente ricerca né nell'industria, né nell'accademia e come i farmaci per queste patologie siano ormai obsoleti. F. Gamarro (CSIC, Granada) ha poi affrontato il problema delle Leishmaniosi.

L'ultima sessione è stata introdotta da R. Bertorelli (Schering Plough, Milano) che ha discusso i meccanismi del dolore neuropatico. V. Di Marzo (CNR, Napoli) ha evidenziato l'importanza per l'insorgenze di questo tipo di dolore dei recettori dei cannabinoidi e dei vanilloidi. D. Madge (University College, Londra) ha evidenziato l'importanza dei canali nella regolazione, dell'impulso nervoso. Infine, F. Micheli (GlaxoSmithKline, Verona) ha sottolineato il parallelismo tra glutammato e dolore, soffermandosi sulla progettazione e lo sviluppo di nuovi antagonisti recettoriali.

Laboratorio di Metodologie Sintetiche in Chimica Farmaceutica

La seconda edizione di questa iniziativa (curata da M. Botta, F. Correlli, C. Mugnaini, A. Paladino, E. Petricci, M. Renzulli, Siena) prende origine dalla constatazione che le metodologie sintetiche svolgono un ruolo fondamentale nella ricerca farmaceutica industriale ed accademica e che la loro rapida evoluzione rende necessario un costante aggiornamento teorico-pratico per i chimici impegnati nella ricerca chimico-farmaceutica.

L'ammissione alla scuola è a numero chiuso, dati i vincoli delle strutture ospitanti e la volontà di consentire ai partecipanti la piena fruizione del corso. La scuola è strutturata in dieci ore di lezioni teoriche, tre pomeriggi di esercitazioni in laboratorio a posto singolo sulle tematiche trattate durante le lezioni e una tavola rotonda finale. Sono stati ammessi 37 giovani ricercatori provenienti da 15 università e 5 industrie assistiti da 18 tra relatori e tutor.

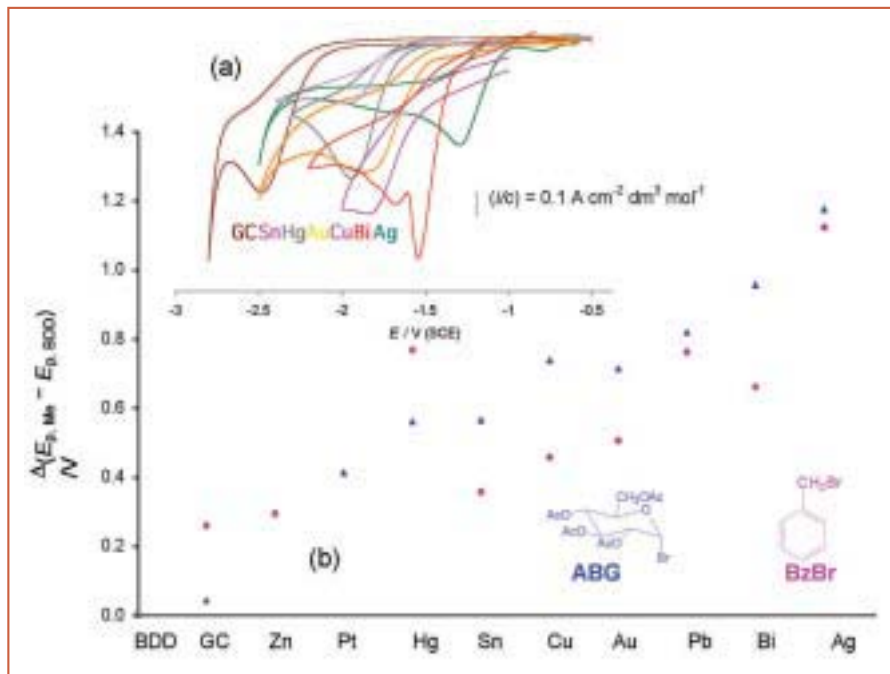
Gli argomenti svolti hanno riguardato aspetti quali la progettazione di librerie CombiChem di piccole molecole e di peptidi, tecnologie sintetiche per CombiChem (reagenti supportati, fluorinated phase, microonde), tecniche analitiche e di purificazione in CombiChem. Le lezioni teoriche sono state tenute alla Certosa di Pontignano, presso la quale sono stati anche ospitati i partecipanti, mentre le esercitazioni si sono svolte nei laboratori del Dipartimento.

R. Pellicciari, Presidente della Divisione di Chimica Farmaceutica.

L'elettrochimica al passo coi tempi

di Paolo Spinelli

Nell'ambito del Congresso nazionale della Sci si sono svolti i lavori delle Giornate dell'Elettrochimica Italiana, che tradizionalmente rappresentano il momento di confronto annuale sulle tematiche scientifiche di interesse della Divisione di Elettrochimica. Con una scelta che si è rivelata molto positiva, si sono organizzate due conferenze plenarie in comune con la Divisione di Chimica Fisica.



Effetto del metallo impiegato come catodo nella riduzione elettrocatalitica di alogenuri organici modello (P.R. Mussini, L. Falciola, M. Longhi, D. Bonanomi, G. Di Silvestro, L. Doubova, Università di Milano)

Alle Giornate dell'Elettrochimica Italiana 2003, svoltesi a Torino lo scorso giugno nell'ambito del Congresso nazionale della Società Chimica Italiana, sono state presentate 37 comunicazioni orali, comprendenti quattro conferenze plenarie ad invito e cinque presentazioni dei premiati per le Tesi di Dottorato e di Laurea. I lavori hanno anche incluso 12 presentazioni nella sessione Poster.

Seguendo una strada già percorsa l'anno passato si è cercato di coordinare alcuni lavori con la Divisione di Chimica Fisica, proponendo due conferenze plenarie, una per ognuna delle due Divisioni, su temi molto attuali di comune interesse: "Fuel Cells and Processes in Nanometric Dimensions" (Stimming, Università di Monaco) e "Analisi ed ottimizzazione dei processi elementari nelle celle fotovoltaiche: quale ruolo per la chimica teorica?" (Adamo, Ecole Nationale Supérieure de Chimie di Parigi). Entrambe le conferenze hanno riscosso notevole successo e sono state seguite da stimolanti discussioni. I lavori si sono articolati in cinque sessioni tematiche, una sessione premi ed una sessione poster.

Environmental electrochemistry and corrosion

La sessione è iniziata con la conferenza plenaria di Jacques Fouletier (Ecole Nationale Supérieure d'Electrochimie et d'Electrometallurgie de Grenoble) su "Electrochemical sensors for environmental applications", nella quale è stata presentata un'approfondita rassegna sui sensori elettrochimici, descrivendoli sia per le specifiche funzionalità sia per le applicazioni, con particolare riferimento a monito-

raggio e controllo ambientale. I lavori sono proseguiti con il contributo "Determinazione tramite ECQCM di films nanometrici elettrodepositati" (Foresti, Firenze), focalizzato sull'ottenimento di composti semiconduttori su elettrodi di argento attraverso il metodo ECALE (Electrochemical Atomic Layer Epitaxy) dell'epitassia a strati atomici, che prevede la deposizione di strati atomici dei singoli elementi che compongono il composto. È stato poi presentato il lavoro "Effect of surface morphology on the electrocatalytic charging process of RuO₂ electrodes" (Doubova, Padova), nel quale sono stati messi in evidenza i processi di "carica" di superfici esposte di monocristalli di RuO₂ in soluzione di H₂SO₄ per un limitato intervallo di potenziale, impiegando le tecniche dell'impedenza e dei transienti.

È seguita la presentazione "Germanium electrodeposition in alkali. Investigation and modelling" (Cattarin, Padova), argomento che presenta un rinnovato interesse di carattere elettrochimico in relazione allo studio di processi redox alla sua superficie e per l'interesse tecnologico di alcune sue leghe con il silicio. Nella sessione è stato anche inserito il contributo "New fields in electrochemistry call for evolution of the potentiostat to face modern needs: a manufacturer point of view" (Lupotto, Milano), in cui sono state presentate le problematiche e le possibili innovazioni riguardanti l'impiego del "potenziostato", strumento indispensabile per la ricerca elettrochimica.

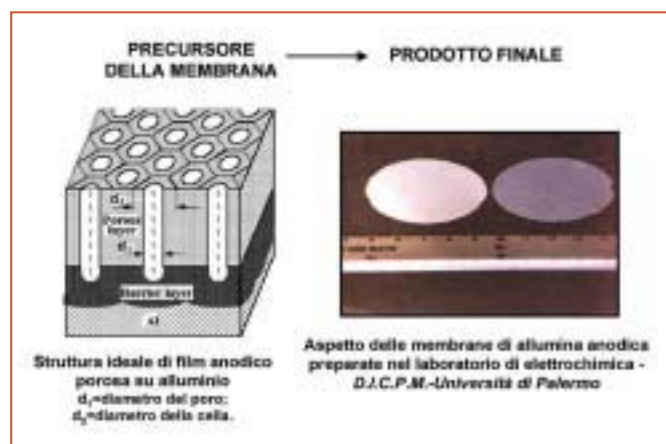
Gli ultimi due lavori della sessione hanno trattato la problematica dell'abbattimento di inquinanti organici biorefrattari con metodi elettrochimici. Il primo, "Electrochemical incineration of oxalic acid. Reactivity and engineering parameters" (Martínez-Huitle, Ferrara), ha riguardato in particolare l'ossidazione dell'acido ossalico su differenti materiali elettrodi (Pb/PbO₂, Pt, and BDD). È stato usato un reattore elettrochimico di nuova concezione con cella a flusso continuo. Nel

P. Spinelli, Politecnico di Torino. paolo.spinelli@polito.it

successivo lavoro "Studies on the electrochemical oxidation of biorefractory organic pollutants" (Saracco, Torino), sono stati presentati i risultati di prove di abbattimento di fenolo in soluzioni di acido solforico con vari anodi (Pt, Ti rivestito con Ir e con ossidi di Ta, PbO_2).

Interfacial processes

La sessione è stata introdotta dalla presentazione "Electrochemical characterization of redox molecules embedded in mesoporous materials" (Penazzi, Torino) riguardante materiali mesoporosi ordinati a base di silice che hanno grande interesse in elettrochimica soprattutto nelle applicazioni ottiche, opto-elettroniche, elettro-cromiche e nei sensori chimici. La sessione è proseguita con il contributo "RhOx-based catalysts for the cathodic evolution of molecular hydrogen" (Kircheva, Milano), in cui si è studiato il comportamento catodico dell'ossido di rutenio nel campo dello sviluppo di idrogeno.



Membrane di allumina anodica (P. Bocchetta, C. Sunseri, F. Di Quarto, Università di Palermo)

Si osserva un massimo della carica superficiale, che risulta proporzionale alla concentrazione di siti attivi, per temperature di calcinazione di 470 °C. Il valore della carica voltammetrica può essere impiegato per valutare lo stato superficiale dell'elettrodo e la sua stabilità. Successivamente è stato presentato un lavoro sulle "Serie liotropiche nelle reazioni redox" (M. Longhi, Milano), in cui si è studiata, mediante voltammetria ciclica e curve di polarizzazione, l'influenza dei cationi alcalini su processi elettrochimici di Co_3O_4 e $LiCoO_2$ drogato con magnesio, che riguardano sia reazioni redox dell'ossido stesso sia la reazione di evoluzione di ossigeno. I processi redox dell'ossido dipendono fortemente dal catione impiegato, con spostamenti verso potenziali più positivi che aumentano lungo la serie Cs, K, Na e Li. È stata poi presentata una nuova tecnologia "Aluminium deposition from room temperature molten salts: effect of 1,10-phenantroline and coatings microstructure characterization" (Lavacchi, Firenze), riguardante l'elettrodeposizione di alluminio da cloro-alluminati, che sono sali fusi a temperatura ambiente e presentano elevata conduttività e bassa volatilità. Sono state considerate varie condizioni di deposizione sia potenziostatiche sia galvanostatiche su diversi substrati quali nichel, rame, magnesio e leghe commerciali di magnesio.

La successiva presentazione: "Preparation of superconductive thick film by electrophoretic technique" (Bodoardo, Torino), ha riguardato la preparazione di materiali superconduttori mediante deposizione elettroforetica, con la quale, oltre ai vantaggi economici, è possibile ottenere film relativamente spessi anche con forme complesse. Sono

stati presentati risultati relativi a YBCO-123 e BSSCO-2223 su substrati di argento e film di MgB_2 su Ti/Al_2O_3 . La sessione si è conclusa con il lavoro "Electrochemical deposition of silver from $AgBF_4$ solution in ionic liquids" (Loglio, Firenze), che ha preso in considerazione l'elettrodeposizione di argento da soluzioni di $AgBF_4$ in butilmetil-imidazolio tetrafluoroborato a temperatura ambiente. L'impiego di liquidi ionici di alta conduttività, buon potere solvente, ampia finestra elettrochimica (>4 V) e basso impatto ambientale rappresenta un'interessante alternativa per i processi galvanici.

Electrochemical power sources

Come precedentemente accennato, la sessione è stata introdotta dalla conferenza plenaria "Fuel cells and processes in nanometric dimensions" (Stimming, Technische Universität München, Germany) in sessione comune con la Divisione di Chimica Fisica. Dopo un'esauriente introduzione sulle *fuel cells* e sulle loro applicazioni, Stimming ha presentato una nuova tecnica *all-in-situ* per studiare l'influenza della dimensione delle particelle sull'attività elettrochimica. Interessanti risultati di questa tecnica sono stati discussi per la loro importanza nei sistemi a *fuel cell*. La sessione è proseguita con la presentazione "Batterie litio-ione a base di litio manganato non stechiometrico" (Arbizzani, Bologna), in cui sono state mostrate le prestazioni di due spinelli ricchi in litio preparati con procedura sol gel (uno ricoperto con polimero conduttore e uno non ricoperto) abbinati ad elettrodi negativi carboniosi convenzionali in configurazione di batteria litio-ione, con opportuni rapporti di masse elettrodiche.

È quindi stato presentato il lavoro "Fabbricazione di membrane di allumina anodica con caratteristiche differenziate" (Bocchetta, Palermo), che ha riportato alcuni risultati relativi allo studio dell'influenza delle variabili di processo sui parametri morfologici delle membrane di allumina ottenute per distacco dal metallo residuo ed etching chimico del film barriera, interposto tra l'ossido e il metallo.

I lavori sono poi proseguiti con il contributo "Characterization of sulphur containing molecules films on gold surface" (M. Cannio, Modena e Reggio Emilia), in cui si mostra che l'interazione di metalli quali Au, Pt, Ag e Cu con tioli, disolfuri e tiopirimidine produce la formazione di *self assembled monolayers* (SAM) adsorbiti, il cui studio offre l'opportunità di comprendere i processi di "auto organizzazione", le relazioni struttura-proprietà e i fenomeni interfacciali.

Di seguito è stato presentato il lavoro "Enthalpy-entropy compensation phenomena in the thermodynamic reduction of electron transport metalloproteins" (Ranieri, Modena e Reggio Emilia), in cui si mette in evidenza che la separazione dei contributi entalpico/entropico al potenziale di riduzione del trasporto elettronico delle metalloproteine è estremamente utile per la comprensione di questo fattore chiave della funzione proteica.

Si è quindi passati al lavoro "Composite catalysts for the cathodic reduction of molecular oxygen" (Fachinotti, Milano), che discute la possibilità di sostituire il CoTMPP, pirolizzato a 900 °C in presenza di carbon black, eccellente elettrocatalizzatore per la riduzione catodica dell'ossigeno, con un catalizzatore composito ottenuto introducendo separatamente $CoCO_3$, carbon black e azoto, allo scopo di ridurre i costi e la difficoltà di sintesi. Nella successiva comunicazione "Catalytic carbon-carbon bond formation by electrolysis under supporting electrolyte-free conditions" (Palombi, L'Aquila), si sono esaminate le recenti strategie basate su tecniche elettrochimiche, sviluppate per realizzare la formazione di legami C-C. Sono state studiate alcune metodologie per l'alchilazione e per processi di addizione coniugata per mezzo dell'elettrogenazione di opportuni enolati in soluzioni di acetonitrile e perclorato di tetraetilammonio.

Molecular electrochemistry

La conferenza plenaria che ha aperto la sessione è stata tenuta da David Cahen del Weizmann Institute of Science di Israele ed ha riguardato l'interessante tema "Coupling molecules and electronic materials: chemical bonding and polarization effects in molecule-based devices". La sessione è proseguita con le presentazioni "Electrocatalytic reduction of model organic halides: the effect of the cathode material" e "The effect of the medium" di Mussini, Falcicola, Longhi, Di Silvestro (Univ. Milano) e Doubova (CNR Padova), in cui sono stati presentati i primi risultati dello studio di un processo elettrocatalitico organico modello, la riduzione degli alogenuri organici, in funzione di parametri chiave quali il materiale catodico (metalli di diversa affinità per gli alogenuri, fra cui spicca Ag, valutati rispetto a materiali non elettrocatalitici di riferimento, quali glassy carbon e boron-doped diamond), lo stato della superficie elettrodica, la struttura molecolare dell'alogenuro, il solvente e l'elettrolita di supporto.

La sessione è continuata con i contributi del gruppo di Padova (Genaro, Ahmed Isse) su "Processi di riduzione elettrocatalitica su argento" e su "Elettrocarbossilazione di cloruri arililici mediante catalisi redox omogenea". L'argento presenta una straordinaria attività catalitica nella riduzione degli alogenuri, in particolare nei confronti di ioduri e bromuri. È stato studiato il comportamento elettrochimico del benzilcloruro (BzCl), scelto come molecola modello, che, in presenza di CO_2 , dà luogo al processo di elettrocarbossilazione, con ottime rese in acido fenilacetico. È stato anche eseguito lo studio sulla elettrocarbossilazione di alcuni 1-aril-1-etil cloruri catalizzata da complessi di nichel o da radicali anioni derivati dagli esteri metil benzoato, metil 4-cianobenzoato, dimetil ftalato e fenil 3-metilbenzoato. Le prove, condotte in $\text{CH}_3\text{CN} + n\text{-Bu}_4\text{NClO}_4$ su catodi di Hg e grafite usando sia celle divise che indivise con anodo sacrificale di Al hanno mostrato un notevole effetto elettrocatalitico con rese elevate per la formazione del corrispondente acido carbossilico.

È stato quindi presentato un lavoro su "Molecular structure effect on the electrochemical activity of ferrocene-labelled peptide nucleic acid oligomers" (Mussini, Falcicola, Baldoli, Maiorana, Univ. Milano) che si inserisce nell'attuale problematica di identificare adatte molecole sonda per il riconoscimento del DNA, trattando la reattività elettrochimica di un monomero di PNA (struttura particolarmente efficace nel legare il DNA) marcato con ferrocene tramite ponte arilitero, e di una serie di suoi precursori, valutando l'effetto della struttura molecolare di complessità crescente su potenziali e correnti di ossidazione e riduzione, e in particolare sulla reversibilità del processo e sui coefficienti di diffusione.

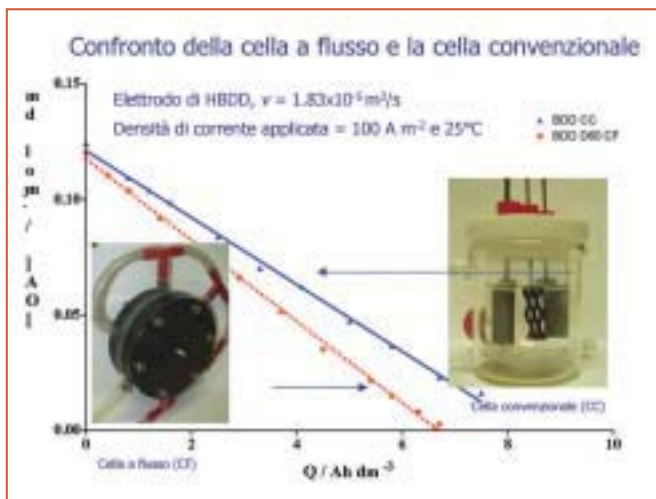
Nel successivo lavoro, "Electrogenerated cyanomethyl anion: synthesis of β -lactams" (Orsini, L'Aquila), è stata presentata una semplice metodologia elettrochimica per la sintesi di β -lattami a partire da acetammidi sostituite attraverso la formazione di un legame N-C4 indotto dall'anione CH_2CN^- elettrogenerato.

Kinetics in electrochemical applications

La sessione è iniziata con il contributo "Kinetics of the electrochemical reduction of Cr(VI) on Cu electrodes" (Fontanesi, Modena e Reggio Emilia) in cui viene messo in evidenza che le curve corrente/potenziale relative alla riduzione elettrochimica di $\text{H}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ in soluzione acquosa contenente acido solforico, ottenute con un elettrodo a disco rotante di rame, sono caratterizzate da tre picchi principali che vengono discussi in relazione ai possibili processi di riduzione. La sessione è proseguita con il lavoro "Electrocatalytic activation of Ni electrodes for H_2 evolution by electroless deposition of Ru" (Irene Bianchi,

Milano), eseguito per migliorare la stabilità dell'attività elettrocatalitica del Ni per la reazione di sviluppo di idrogeno; sono stati studiati alcuni processi di attivazione della superficie del nichel, eseguendo una deposizione electroless di Ru da soluzioni di RuCl_3 .

Nella successiva presentazione "Electron transport through molecular systems organized between two metal surfaces" (M.A. Rampi, Ferrara), è stato descritto un metodo sperimentale per realizzare giunzioni a scala nanometrica di due film organici strutturati (self-assembled monolayers, SAM) interposti tra due elettrodi metallici, secondo lo schema Hg-SAM//SAM-metallo (mercurio, oro, argento). Il lavoro descrive e discute quattro varianti di questo schema. Infine il contributo "Beha-



Abbattimento di inquinanti organici (C.A. Martínez-Huitle, S. Ferro, C. Urgeghe, I. Boari, A. De Battisti, Università di Ferrara)

viour of lead-dioxide in sulphuric media containing phosphoric acid" (C. Francia, Torino), ha riguardato lo studio dell'influenza dell'acido fosforico come additivo nelle batterie al piombo, per i positivi effetti sulla vita delle batterie stesse. L'acido fosforico agisce tramite l'adsorbimento di ioni fosfato e formazione di composti superficiali. Nel lavoro si sono studiate le modifiche strutturali del PbO_2 in presenza di acido fosforico e le conseguenti risposte elettrochimiche.

Sessione premi

Nel corso della sessione riservata ai tradizionali premi della Divisione di Elettrochimica, quest'anno sono stati assegnati il premio di Dottorato "Divisione di Elettrochimica" a Luigi Falcicola (Università di Milano) per la Tesi "Thermodynamics, transport and solvation in aqueous-organic mixed solvents: fundamentals and applications in electrochemistry and electroanalysis" ed il premio di Dottorato "Fondazione Oronzio De Nora" a Priscilla Reale (Università di Roma) per la Tesi "Titanati di litio e fosfati di ferro quali elettrodi ad inserzione per batterie Li ione: struttura e proprietà".

Per quanto riguarda le Tesi di Laurea, sono stati assegnati: il premio di Laurea "Divisione di Elettrochimica" dedicato alla memoria del Prof. Mario Maja a Fabrizio Ciuffa (Università di Roma) per la Tesi "Studio di sistemi polimerici a conduzione protonica come elettroliti in celle a combustibile", il premio di Laurea "Solartron Dataline" a Stefania Rapino (Università di Bologna) per la Tesi "Elettrochimica di molecole e supermolecole ad elettrodi modificati" ed il premio di Laurea "Divisione di Elettrochimica" a Marzia Bellei (Università di Modena e Reggio Emilia) per la Tesi "Caratterizzazione spettroelettrochimica delle proprietà redox di EME-Perossidasi".

Chimica fisica, scienza interdisciplinare

di Gianmario Martra, Maria Cristina Menziani

Tre sono state le linee guida dell'attività della Divisione di Chimica Fisica nel corso del 2003 a favore della ricerca: supporto a iniziative dedicate a temi specifici, la valorizzazione dei "giovani", la promozione del dibattito scientifico, dall'ambito disciplinare all'intersezione con gli altri settori della Chimica.

Nel corso del 2003, l'attività della Divisione di Chimica Fisica in favore della ricerca scientifica ha seguito tre direttrici principali, relative alla promozione di convegni e congressi dedicati a settori o argomenti specifici, alla formazione post-laurea e alla presentazione delle ricerche svolte a livello nazionale nell'insieme dell'ambito disciplinare. Nel primo caso, la Divisione è intervenuta come sponsor di tre eventi: il VI Convegno "Complex systems: structure, properties, reactivity and dynamics", svoltosi a Bologna nei giorni 10-13 luglio, il meeting congiunto dell'Associazione Italiana di Cristallografia e della Società Italiana di Luce di Sincrotrone, che si è tenuto a Trieste dal 21 al 25 luglio 2003, ed il Congresso Nazionale di Chimica Computazionale, che ha avuto luogo a Siena nelle giornate del 18 e 19 dicembre 2003. Il convegno di Bologna ed il congresso di Siena hanno inoltre visto la partecipazione di vari soci della Divisione ai comitati organizzatori e/o scientifici di tali eventi.

Simulazioni computazionali multiscala applicate alle scienze dei materiali

L'intervento a favore della formazione post-laurea si è realizzato, in collaborazione con la Divisione di Chimica Inorganica, il Gruppo Interdisciplinare per la Chimica e Tecnologie dei Materiali, nell'istituzione di una Scuola Nazionale in "Simulazioni computazionali multiscala applicate alle scienze dei materiali" che si è tenuta presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Modena e Reggio Emilia dal 17 al 21 febbraio 2003. La natura inerentemente multidisciplinare della chimica computazionale ha favorito l'integrazione di aree culturali diverse, come testimoniano le adesioni pervenute da dottorandi, borsisti, ricercatori dell'università e dell'industria appartenenti ad ambiti di studio di tipo chimico, fisico, geologico ed ingegneristico. La scuola si proponeva l'obiettivo di fornire un'introduzione alle metodologie principalmente utilizzate per il modelling dei materiali a livello atomistico, mesoscopico e macroscopico. I fondamenti teorici e computazionali di diverse tecniche di modellizzazione (Metodi

G. Martra, Dipartimento di Chimica IFM - Università di Torino; M.C. Menziani, Dipartimento di Chimica, Università di Modena e Reggio Emilia. gianmario.martra@unito.it

**Scuola Nazionale in
Simulazioni Computazionali Multiscala
Applicate alle Scienze
dei Materiali**
Modena 17-21 Febbraio 2003

La scuola intende fornire una introduzione alle metodologie principalmente utilizzate per il modelling dei materiali a livello atomistico, mesoscopico e macroscopico. I fondamenti teorici e computazionali di diverse tecniche di modellizzazione verranno presentati in mini-corsi. Esercitazioni guidate e sessioni seminarie si metteranno in luce le potenzialità dei metodi e la loro versatilità, nonché la loro importanza nella progettazione di nuovi materiali, se utilizzati come strumenti complementari alle tradizionali tecniche sperimentali.

Destinatari:
La Scuola è rivolta a laureati in formazione (dottorandi, borsisti, ricercatori, etc.) principalmente nelle scienze delle simulazioni molecolari, interessati a comprendere le potenzialità delle tecniche di modellizzazione sia nella ricerca di base che nella ricerca industriale e ad applicare tali tecniche a diversi livelli di scala, dalle dimensioni molecolari a quelle del prodotto finale.

Argomenti trattati:
• Simulazioni Computazionali ed Esperimenti di Laboratorio
• Metodi Quantistici - Dinamica Molecolare (MD)
• Metodi Quantistici (QM)
• Metodi Ibridi (QM/MM)
• Metodi Mesoscala e Macroscale

Utenti Informatori:
Dr. M. C. Menziani
Dipartimento di Chimica
Università di Modena e R.E.
Via Campi 183,
41100 Modena
Tel 059/2855001
acmenziani@unimore.it

Iscrizioni:
Il modulo di iscrizione è reperibile al sito: www.chimica.unimore.it/interdisciplinare. La domanda va inoltrata entro il 13 Dicembre 2002 a: interdisciplinare@unimore.it. La quota di iscrizione alla Scuola è di 360 Euro e dovrà essere versata entro il 23 Gennaio 2003.

Info di Partecipazione:
È a disposizione un numero limitato di posti per la scuola. Le richieste di iscrizione e le domande di giovani ricercatori, che desiderano partecipare alla scuola, dovranno essere inviate alla Segreteria della Scuola entro il 13 Dicembre 2002. L'assegnazione sarà effettuata sulla base del numero di richieste di iscrizione e sulla base delle domande di giovani ricercatori entro il 13 Gennaio 2003.

La locandina della Scuola Nazionale in "Simulazioni computazionali multiscala applicate alle scienze dei materiali"

di Classici - Meccanica Molecolare (MM), Dinamica Molecolare (MD), Metodi Quantistici (QM), Metodi Ibridi (QM/MM), Metodi Mesoscala e Macroscale) sono stati presentati in mini-corsi. Le lezioni teoriche sono state integrate con esercitazioni pratiche allo scopo di mettere in luce le potenzialità dei metodi e la loro versatilità. L'applicazione a comuni problemi di ricerca nel campo dei materiali amorfi, ossidi cristallini, zeoliti e materiali compositi è stata presentata in seminari atti a sottolineare come la capacità interpretativa e predittiva di queste tecniche le renda complementari alle tradizionali tecniche sperimentali ed indispensabili per la progettazione razionale di nuovi materiali. La sessione poster a cura degli allievi ha contribuito a favorire lo scambio di esperienze ed idee tra ricercatori che già utilizzano o sono intenzionati a utilizzare questi strumenti in ambiti molto diversi tra loro.

La conferma del concreto interesse degli studenti e ricercatori nei confronti dell'iniziativa è venuta dall'alto numero di richieste di partecipazione: per i 21 posti disponibili sono pervenute oltre 70 domande.

Organizzando un sistema di doppio turno è stato possibile ammettere alla partecipazione 42 studenti, il 50% dei quali ha fruito di borse di partecipazione a copertura totale o parziale della quota d'iscrizione, grazie anche al patrocinio dei partner sopracitati. Gli studenti hanno affrontato l'impegno con interesse ed entusiasmo e hanno espresso un grado di soddisfazione globale per la qualità e contenuti del corso piuttosto buono, come riscontrato dall'analisi dei questionari distribuiti. Si è pertanto valutata positivamente la possibilità di ripetere la scuola allargando l'offerta formativa ad ambiti disciplinari individuati dalle risposte fornite al questionario. La Seconda Scuola Nazionale in "Simulazioni Computazionali Multiscala Applicate alle Scienze dei Materiali" si terrà a Modena dal 16 al 20 febbraio 2004 (<http://www.chimica.unimo.it/eventi/scm>).

Nell'ambito della promozione del lavoro dei giovani ricercatori e del riconoscimento della sua specificità, la Divisione di Chimica Fisica ha poi partecipato, unitamente alle altre Divisioni, alla costituzione del "Gruppo Giovani" della Società Chimica Italiana.

Il Congresso Nazionale

La terza tipologia di attività, finalizzata all'interscambio scientifico all'interno della comunità chimico-fisica italiana, si è concretizzata nel Congresso Divisionale, svoltosi nell'ambito del XXI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, tenutosi a Torino alla fine del mese di giugno. I lavori si sono articolati in 7 sessioni orali, di



Un momento della commemorazione del Prof. Fagherazzi

cui 6 dedicate a varie aree di attività scientifica del settore disciplinare (Chimica Fisica dei Materiali, Chimica Teorica e Computazionale, Chimica Fisica Biologica, Cinetica e Dinamica Molecolare, Spettroscopia, Chimica Fisica delle Superfici e delle Interfasi), ed una, a tematica trasversale, riservata a giovani ricercatori non strutturati. In aggiunta alle sessioni orali, si sono svolte due sessioni poster, nelle quali sono stati presentati 130 contributi relativi alle varie aree tematiche sopra elencate.

Dato che l'occasione del Congresso Nazionale Sci facilitava le connessioni con altri ambiti disciplinari, nel novero delle relazioni plenarie tenute nel corso dei lavori della divisione di Chimica Fisica, la relazione introduttiva della sessione Chimica Teorica e Computazionale si è configurata come attività comune con la Divisione di Elettrochimica, che ha sua volta ha condiviso con la comunità Chimico-Fisica una delle relazioni plenarie previste nel suo programma.

Nel corso dei lavori della Divisione di Chimica Fisica hanno anche trovato collocazione due Workshop organizzati da Gruppi Interdivisionali (G.I.) afferenti alla Divisione stessa, il G.I. di Calorimetria ed Analisi Termica, il cui simposio è stato dedicato al tema "Calorimetry and Thermal Analysis for the New Frontiers of Chemistry", ed il G.I. di Chimica Strutturale, i cui lavori sono stati articolati in una serie di

key-notes e di relazioni orali relative a studi svolti negli ambiti disciplinari della Chimica dei Sistemi Biologici, della Chimica Fisica e della Chimica Inorganica. Con l'obiettivo di estendere i contatti con altre discipline chimiche anche al di fuori degli aspetti riguardanti la ricerca scientifica, è stata inoltre organizzata una Tavola Rotonda sulla Didattica, dal titolo "Lauree Triennali e Lauree Specialistiche: prime valutazioni e prospettive di cambiamento", a cui hanno partecipato come oratori anche colleghi dei settori scientifico-disciplinari Chimica Analitica e Chimica Inorganica.

Le relazioni scientifiche

Quanto agli argomenti oggetto delle relazioni scientifiche, nella sessione inaugurale "Chimica Fisica dei Materiali", dedicata al Prof. Giuliano Fagherazzi, Professore Ordinario all'Università di Venezia e figura autorevole del settore, scomparso ai primi di settembre 2002, sono state presentate ricerche relative allo studio di fasi nanometriche (in riferimento ad aspetti strutturali, proprietà ottiche, modellizzazione), di materiali per l'accumulo e la conversione di energia, di pigmenti ceramici.

Nel campo della Chimica Teorica e Computazionale sono stati trattati aspetti di trasferibilità dei risultati di modellizzazioni all'ottimizzazione di proprietà e funzionalità di materiali, la messa a punto di metodologie computazionali, il calcolo di proprietà di gas, mezzi solventi, solidi nanostrutturati e di processi fotoindotti. Per la tematica "Chimica Fisica Biologica" sono stati svolti interventi relativi ad aspetti termodinamici, dinamici e strutturali di fenomeni che coinvolgono biomolecole e biopolimeri, anche per quanto riguarda le interazioni con il mezzo solvente acqua, affrontati sia con tecniche sperimentali sia con metodi di simulazione. Gli studi di Cinetica e Dinamica Molecolare presentati hanno riguardato reazioni di interfaccia solido-gas, anche in riferimento a processi di interesse ambientale, aspetti fondamentali di reazioni in fase gas condotte in condizioni controllate, transizioni conformazionali di substrati proteici in soluzione, proprietà dinamiche di soluzioni di osmoprotettori e di reticoli cristallini microporosi. I contributi relativi alla "Spettroscopia" hanno spaziato dallo studio di reazioni chimiche in fasi condensate sotto alte pressioni, alle caratteristiche rotazionali di addotti molecolari, alle applicazioni allo studio di superfici di solidi altamente dispersi, all'analisi conformazionale-orientazionale di cristalli liquidi e strutturale di liquidi "H-bonded", alle proprietà ottiche di sistemi molecolari e reticolari. Nelle relazioni inerenti la Chimica Fisica delle Superfici e delle Interfasi sono stati illustrati i risultati di ricerche relative a fenomeni di riconoscimento molecolare su scala mesoscopica e di auto-organizzazione su scala molecolare, proprietà di interfaccia di sistemi trifasici, adsorbimento e reazioni alla superficie di nanoparticelle metalliche e microparticelle carboniose, processi di formazione e caratteristiche di superficie di materiali silicei ad elevato sviluppo superficiale.

Nella sessione dedicata ai giovani ricercatori non strutturati, a carattere tematico trasversale, hanno trovato collocazione contributi relativi a cluster formati da biomolecole e metalli, sistemi biomimetici, dinamica di reazioni in fase eterogenea, proprietà di superficie di catalizzatori eterogenei innovativi con applicazioni ambientali, processi reattivi chimici e fotochimici di sistemi molecolari in soluzione e all'interfaccia acqua/semiconduttore. A complemento di questa cartellata, forzatamente sintetica, si rimanda chi fosse interessato ad un approfondimento degli argomenti trattati alla consultazione del sito web della Divisione di Chimica Fisica (www.fci.unibo.it/dcfsci/home.htm), dove, seguendo in successione i link "Attività" e "Congressi" potrà trovare la serie pressoché completa del materiale proiettato durante le presentazioni svolte durante le varie sessioni.

Con l'industria chimica nel nuovo millennio

di Carlo Perego

Il Congresso Nazionale di Torino e le commemorazioni del centenario della nascita di Giulio Natta sono stati gli eventi attorno a cui hanno ruotato le attività della Divisione nel 2003, focalizzate sui trend della industria chimica italiana, sul ruolo propulsivo della catalisi e sul contributo dell'chimica dei diversi settori dell'industria.

Nel 2003, l'attività culturale della Divisione di Chimica Industriale è stata sviluppata perseguendo alcuni obiettivi: ampliare i contatti con la comunità dei chimici che operano nell'industria; consolidare la collaborazione con il Gruppo Interdivisionale di Catalisi nell'elaborazione di una proposta di respiro internazionale per la catalisi eterogenea; avviare rapporti di collaborazione con organizzazioni internazionali; collaborare con altri soggetti della Società Chimica Italiana e della comunità scientifica nella promozione dell'immagine della chimica; favorire la partecipazione dei giovani chimici alla vita associativa. Alla luce di questo piano vanno quindi inquadrati gli eventi organizzati dalla Divisione, che hanno avuto un "leit motiv" praticamente costante, la ricorrenza del centenario della nascita di Giulio Natta, premio Nobel per la Chimica.

L'evento centrale è stato il XXI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana di Torino (23 al 26 giugno), dove accanto ad un minisimposio dal titolo "Advanced tools for catalysts characterization at atomic and molecular level", organizzato in collaborazione con il Gruppo Interdivisionale di catalisi, la Divisione ha tenuto il proprio convegno. In questo ambito un'attenzione particolare è stata dedicata all'industria, con una scelta di alcune "invited lectures" industriali, accanto a quelli accademici. Nella seconda parte di questo articolo verranno riassunti e commentati i contributi più salienti di questo convegno.

La commemorazione per il centenario della nascita di Giulio Natta è stata al centro di numerosi eventi, tra i quali il XXI Congresso della SCI. La Divisione di Chimica Industriale ha collaborato con GIC, Sezione Lombardia ed altre associazioni all'organizzazione di un ulteriore "Omaggio a Giulio Natta: chimica e industria", il 6 ottobre a Milano. Il convegno, organizzato dal Politecnico di Milano, partendo dall'attenzione che Giulio Natta ha sempre rivolto ai problemi di ricerca di interesse industriale e applicativo, ha voluto analizzare il ruolo crescente della ricerca chimica nei diversi settori industriali.

Attività varie

Nel 2003 si è tenuto il VII Seminario Nazionale di Catalisi, organizzato dal Gruppo Interdivisionale di catalisi e dalla Divisione di Chimica Industriale. Questa edizione si è svolta a Venezia (29 giugno-4 luglio) e ha avuto come titolo "Nuove frontiere della catalisi moleco-



**Conferimento della targa a Ferruccio Trifirò
durante il XXI Congresso Nazionale della SCI**

lare". Il Seminario di Catalisi è diventato un momento qualificante della comunità dei "catalisti" italiani, che riceve sempre più attenzione e partecipazione a livello internazionale. Il programma del seminario è disponibile nel sito <http://helios.unive.it/~chimica//seminar/index.htm>. Gli aspetti salienti del seminario verranno illustrati in un altro articolo di questa rivista.

La Divisione di Chimica Industriale ha patrocinato un interessante seminario della Sezione Lombardia, dedicato alla proprietà intellettuale. Il seminario si è tenuto a Milano il 14 ottobre con il supporto anche di altre divisioni della SCI. Il programma prevedeva 8 contributi e aveva l'obiettivo di fornire gli strumenti per una gestione strategica della proprietà intellettuale.

Dal 15 al 17 ottobre si è tenuto a Dresda in Germania, un convegno su un tema di attualità: l'idrogeno. Il congresso dal titolo "Innovation in Manufacture and Use of Hydrogen" è stato organizzato dal DGMK, *German Society for Petroleum and Coal Science and Technology*, in collaborazione con la Divisione di Chimica Industriale della SCI e con l'*Association Française des Techniciens du Pétrole* (AFTP). Questa è stato il primo momento di collaborazione tra la nostra Divisione e la DGMK, ma sono già in programma attività per il futuro. Nel 2004 si organizzerà insieme una conferenza internazionale su C4/C5 hydrocarbons a Monaco di Baviera. Il congresso sull'idrogeno ha visto la partecipazione di un centinaio di conferenzieri, tra questi anche una rappresentanza di italiani che hanno contribuito al programma con due presentazioni orali e un poster. Il programma del congresso è scaricabile dal sito <http://www.dgmk.de>.

Infine il 10 novembre a Milano si è tenuto un seminario dal titolo "Industrial Oxidations: recent developments and perspectives".

C. Perego, Divisione di Chimica industriale.

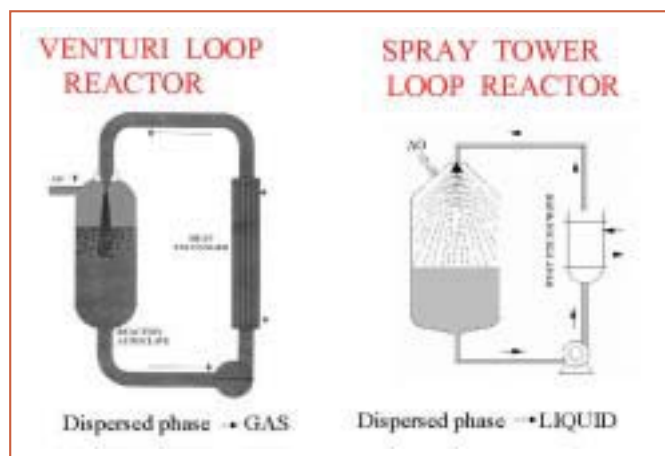


Figura 1 - Reattori industriali di etossilazione

Dopo il successo del precedente, dedicato alle idrogenazioni, la Divisione di Chimica Industriale e la Sezione Lombardia, col patrocinio del GIC, hanno proposto una nuova edizione dedicata alle ossidazioni. Il programma del seminario prevedeva 7 lectures tenute da altrettanti esperti italiani e stranieri (<http://www.dcci.unipi.it/~bea/scidci/welcome.html>). La prima lezione è stata tenuta da Ferruccio Trifirò, a cui il seminario era dedicato in occasione del 65° compleanno. Al fine di promuovere la partecipazione di giovani agli eventi la Divisione ha finanziato numerose borse di studio sia per il VII Seminario Nazionale di Catalisi sia per il XXI Congresso della Società Chimica Italiana.

Congresso nazionale della Divisione di Chimica industriale

All'inizio del nuovo millennio l'industria chimica italiana, come parte di una più ampia evoluzione mondiale, sta conoscendo un profondo cambiamento per rispondere alle nuove sfide. Innovazione tecnologica quale fattore chiave di competizione, sfida ambientale, e-chemistry, concentrazione nel core business creano uno scenario in continua evoluzione che offre grandi prospettive ma richiede una nuova mentalità e una maggior tempestività nel trasformare una buona idea scientifica in un nuovo processo a mercato. In questo contesto il convegno della Divisione di Chimica Industriale, nell'ambito del XXI Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana, si è proposto di valutare le tendenze evolutive della chimica industriale e le risposte di ricerca e sviluppo che la comunità accademica e industriale italiana sono in grado di offrire. Il convegno si è tenuto a Torino, con un programma denso di contributi (5 conferenze plenarie, 24 comunicazioni orali e 46 poster), oltre al minisimposio di catalisi. Il convegno è stato anche l'occasione per l'assegnazione di una targa al prof. Ferruccio Trifirò (vedi foto di apertura), in segno di riconoscimento per la proficua attività scientifica dedicata allo sviluppo della catalisi eterogenea e dei processi catalitici. Stefano Rossini, coordinatore del GIC, ha sottolineato che il conferimento della targa vuole essere un riconoscimento per gli innumerevoli successi conseguiti, sia a livello scientifico sia tecnologico, ed un ringraziamento per il dinamismo e l'impegno profuso, anche a livello

didattico, nel diffondere e promuovere la catalisi e la chimica industriale in Italia e nel mondo. I lavori sono stati suddivisi in sessioni, oltre alla consueta sessione poster:

- minisimposio di catalisi
- catalisi e processi di chimica industriale
- polimeri e materiali polimerici.

Nel minisimposio di catalisi la conferenza plenaria è stata presentata da Michel Che, dell'università Pierre et Marie Curie di Parigi. Partendo dalla considerazione che i catalizzatori supportati su ossidi rappresentano la più importante classe di catalizzatori industriali, anche sotto l'aspetto economico, Michel Che ha evidenziato quanto sia utile un approccio su base molecolare per la progettazione delle caratteristiche del catalizzatore e quanto a questo scopo siano utili le tecniche di indagine spettroscopica.

Il minisimposio ha quindi presentato le diverse tecniche di indagine per la caratterizzazione dei catalizzatori eterogenei (XPS, XAFS, NMR, EPR, FTIR, DRIFT, Raman, UV-Vis, electron microscopy, atomic force microscopy). Le presentazioni, che erano organizzate con una prima parte di carattere generale ed una seconda applicativa, hanno fornito una visione generale delle tecniche disponibili e delle informazioni da esse ottenibili, fornendo utili indicazioni agli utilizzatori finali dei catalizzatori. La rassegna è risultata completa e dettagliata e ha mostrato l'alto livello di competenza e qualità raggiunto in questo settore dalla comunità scientifica italiana. La sessione di Catalisi e Processi di Chimica Industriale è stata introdotta da Elio Santacesaria, dell'Università di Napoli, che ha illustrato un esempio di sviluppo di un processo chimico, dal laboratorio alla scala industriale. L'esempio riguardava la produzione di tensioattivi via etossilazione di alchilfenoli. Sono stati presi in considerazione tutti gli aspetti, dal chimismo alla termodinamica, dalla cinetica chimica ai problemi di trasferimento di massa e di energia. È stato ricavato un modello cinetico in grado di descrivere l'evoluzione nel tempo delle diverse specie chimiche e con tale modello sono stati simulati i reattori a completa miscelazione e quelli a ricircolazione (Figura 1).

Più sul fronte ingegneristico, la "lecture" di Gianpiero Groppi del Politecnico di Milano, è stata dedicata ai catalizzatori monoliti strutturati. La possibilità di disegnare le loro proprietà geometriche e di selezionare i materiali che li costituiscono permette di ottenere proprietà uniche di trasferimento di massa e calore. Potrebbero trarre beneficio da queste proprietà tutte le applicazioni in cui risulta critico il controllo della temperatura, quali ad esempio i combustori catalitici per turbine a gas con emissioni ultra basse di NO_x e i processi catalitici altamente esotermici (Figura 2). Tra i numerosi altri

contributi alla sessione vale la pena di sottolineare la presentazione di Stefano Rossini del nuovo processo Eni per la produzione di idrogeno in singolo stadio con la sequestrazione intrinseca di CO_2 . Il processo così concepito permette di produrre simultaneamente due correnti pure di idrogeno e CO_2 , senza dover ricorrere agli onerosi processi di separazione di CO_2 basati su adsorbimento.

La sessione sui polimeri è stata introdotta da Federica M. Benvenuti (BP Solvay Polyethylene) con una review sui catalizzatori *single-site* (SSC) non metalloceni per la sintesi di polietilene. La presentazione ha percorso tutti gli stadi dello sviluppo del catalizzatore, dalla sintesi in laboratorio fino alla scala industriale, per concludersi con la fase di commercializzazione del polimero (Figura 3), ponendo l'attenzione sulle diverse scelte strategiche che possono essere effet-

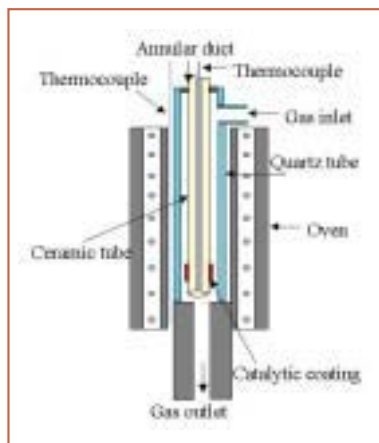


Figura 2 - Microreattore catalitico anulare per misure cinetiche di reazioni ultraveloci e fortemente esotermiche

Istruzioni per gli Autori

La Chimica e l'Industria è una rivista di scienza e tecnologia e di informazione per i chimici.

Nella rubrica *Attualità* ospita articoli, su argomenti di interesse rilevante per tutti coloro che operano nella chimica, richiesti dalla redazione. Ospita inoltre comunicati brevi, lettere e informazioni varie (che il Direttore si riserva di pubblicare) della lunghezza massima di 1.000 battute. Nella sezione *Science and Technology* pubblica in inglese monografie scientifiche di chimica, ingegneria chimica e tecnologie farmaceutiche. Nella sezione *Chimica e...* ospita articoli in italiano di carattere più generale e di taglio applicativo, tecnologico e informativo per tutti i settori scientifici e professionali di interesse per la chimica.

I testi debbono essere inviati a mezzo posta, piazzale R. Morandi, 2 - 20121 Milano, o via e-mail, edichim@tin.it, alla Redazione scientifica de *La Chimica e l'Industria*. Tutti i testi saranno esaminati da due referee. Gli autori sono tenuti a non inviare ad altri organi di stampa testi il cui contenuto corrisponde a quello sottoposto a *La Chimica e l'Industria*.

TESTI

I testi debbono essere trasmessi in due copie, complete di tabelle e figure, con chiara indicazione dei nomi degli autori, scrivendo per esteso anche il nome di battesimo, gli Istituti o Enti presso i quali svolgono la loro attività e relativo indirizzo. *Va allegato inoltre un breve riassunto del testo sia in italiano sia in inglese* (max 500 battute ciascuno). È anche richiesto il testo registrato su dischetto da 1,44 Mb o su CD-Rom.

I testi dovranno essere contenuti in *non più di 15 cartelle* (60 battute per 30 righe) per la sezione *Science and Technology* (per la quale è anche richiesto l'invio di una pagina in italiano di circa 3.000 battute per la presentazione sulla copia cartacea della rivista) e *non più di 7 cartelle* per la sezione *Chimica e...*, comprensive di tabelle e figure.

I richiami bibliografici (*non più di 30-35*), da citare all'interno del testo, devono essere numerati progressivamente, con numeri arabi tra parentesi quadre. La bibliografia va riportata in fondo al testo secondo gli esempi:

- [1] D. Breck, *Zeolite Molecular Sieves*, J. Wiley, New York, 1974, 320.
- [2] R.D. Shannon, *Acta Crystallogr.*, 1976, **32**, 751.
- [3] *U.S. Pat.* 4.410.501, 1983.
- [4] G. Perego *et al.*, *Proceedings of the 7th Int. Conf. on Zeolites*, Tokyo, 1986, Tonk Kodansha, Elsevier, Amsterdam, 129.

Nella stesura del testo, infine, si prega di non effettuare la sillabazione manuale con i trattini. *La redazione invita inoltre gli Autori ad inviare in allegato (fuori testo) con gli articoli anche fotografie o illustrazioni relative al contenuto, sia di tipo simbolico sia descrittivo, per migliorare l'aspetto redazionale e comunicativo (la direzione se ne riserva comunque la pubblicazione).*

TABELLE, FIGURE E FOTOGRAFIE

Le tabelle devono essere impostate *utilizzando esclusivamente le tabulazioni* e devono essere scritte su fogli distinti da quelli del testo, così come le fotografie e i disegni. Le figure al tratto (grafici, schemi di apparecchiature, di processi e impianti ecc.) devono essere fornite su carta, utilizzando esclusivamente stampanti laser, e devono essere omogenei tra loro dal punto di vista del carattere utilizzato e dei corpi tipografici. In caso di invio tramite e-mail sono accettati i formati grafici (jpg, tif, eps). Si ricorda inoltre che le diciture all'interno della figura devono essere scritte nella stessa lingua utilizzata per la redazione del testo, nitide e con chiare descrizioni e indicazioni delle dimensioni del soggetto (micrografie con dato dell'ingrandimento, ad es.: $\times = 1 \text{ nm}$).

REPRINT

Gli autori potranno richiedere i reprint dei loro articoli solo al momento della visualizzazione delle bozze e solo a mezzo pagamento. Il costo verrà comunicato in risposta alla richiesta. Alternativamente potrà essere inviato il file Pdf.

tuate dalle Società. Ad esempio BP Solvay Polyethylene, nella ricerca di nuovi catalizzatori, si avvale di collaborazioni esterne per la parte di sintesi dei nuovi possibili SSC, mentre effettua al proprio interno i test prestazionali e le attività di sviluppo. Mario Visca della Solvay Solexis ha invece raccontato un'interessante "case history" sulla tecnologia industriale dei perfluoropolimeri. Questa famiglia di polimeri fluorurati, ottenuti per ossidazione fotochimica di olefine perfluorurate è un esempio brillante della capacità di innovazione dell'industria chimica italiana, accanto ad altri più famosi (polipropilene isotattico, MTBE). Da quando sono stati introdotti sul mercato, oltre trent'anni fa dalla Montecatini, questi materiali si sono affermati come fluidi ad alte prestazioni ed oli per applicazioni speciali (per esempio: Fomblin e Galden), trovando applicazioni dall'industria elettronica a quella aerospaziale, dall'alto vuoto fino alla protezione dei beni architettonici.

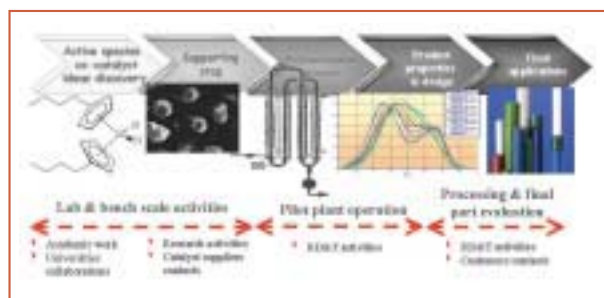


Figura 3 - La catena del valore dell'innovazione del catalizzatore di polimerizzazione

Di storia della chimica industriale ed in particolare delle grandi scoperte nella chimica dei polimeri ha parlato Luigi Trossarelli (Università di Torino). La scoperta tra il 1930 e il 1935 di neoprene, nylon e polietilene è stata raccontata in modo accattivante, senza indugiare sui dettagli, ma solleticando la curiosità dell'auditorio con curiosità ed aneddoti. Luigi Costa (Università di Torino) ha trattato della preparazione di nanocompositi polimerici a base di polietilene compatibilizzato con poli(etilene-covinilacetato) in cui è dispersa al 5% in peso una montmorillonite, scambiata con ottadecilammonio. I nanocompositi preparati per dispersione del filler in polimero fuso evidenziano uno spostamento di circa 5 °C del massimo di perdita in peso determinato all'analisi TGA, rispetto al polimero puro. Il filler inorganico può esplicare proprietà antifiama nel composito polimerico.

Franco Cataldo (Trelleborg Wheel Systems/Pirelli Agri Tyres) ha evidenziato come nel nero wheel sono presenti strutture di tipo fullerene o fogli di grafite di varia curvatura, derivando la curvatura dalla presenza di anelli pentagonali o altri difetti inseriti nella grafite, che è costituita da anelli esagonali condensati. L'utilizzo di trattamenti con radiazioni ad alta energia prima della preparazione della gomma permette di aumentare la quantità di strutture tipo fullerene presenti nel nero fumo, migliorando le proprietà meccaniche delle gomme.

Il convegno si è chiuso con l'attraente "lecture" di Ernesto Illy (Illycaffè SpA), dal titolo "La scienza al servizio dell'innovazione: il futuro delle imprese". Dopo aver sottolineato la complessità della tecnologia per la produzione del caffè e la conseguente necessità di ricorrere a competenze interdisciplinari, che vanno dalla chimica alla biologia, dalla matematica alla ingegneria, Illy ha ricordato la necessità di stimolare i giovani ad intraprendere studi scientifici, al fine di evitare che vengano a mancare i matematici, i biologi molecolari, i chimici.

Attualità della ricerca in Chimica Inorganica

di Felice Faraone

La Chimica Inorganica orienta sempre più la propria ricerca verso tematiche di grande attualità. È quanto emerso in modo chiaro dal XXXI Congresso Divisionale. È risultata evidente la capacità dei Chimici Inorganici Italiani di cogliere gli aspetti innovativi della ricerca e di sapere rimodulare, in una nuova prospettiva, i processi di formazione delle giovani leve.



Foto di gruppo dopo il conferimento della Medaglia Sacconi al prof. Luis Oro. Al centro è la moglie del prof. Sacconi

È tradizione consolidata, per la Divisione di Chimica Inorganica della SCI, porre al centro della propria programmazione annuale, il Congresso Nazionale e la Scuola per Dottorandi. Entrambe queste iniziative puntano, anche se in modo diverso, al coinvolgimento dei ricercatori che operano nei diversi settori della Chimica Inorganica, dando loro, tra l'altro, l'opportunità di uno scambio di esperienze e di ampliare le prospettive del proprio lavoro.

XXXI Congresso Nazionale

Nel 2003, il XXXI Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Inorganica, essendosi svolto a Torino dal 22 al 27 giugno, congiuntamente al XXI Congresso della Società Chimica Italiana, ha potuto godere dei benefici derivanti dalla celebrazione di un evento particolarmente importante. Come consuetudine, il Congresso Divisionale è stato articolato in sessioni dedicate a specifiche tematiche, quali chimica organometallica, reattività chimica, catalisi, chimica dei materiali inorganici, bioinorganica, struttura e modellistica di composti inorganici. Sono state previste conferenze plenarie su temi di particolare attualità e comunicazioni orali da parte di ricercatori. Luigi Marzilli, della Louisiana State University, nella Conferenza plenaria "Adventures in science with my Italian collaborators" ha percorso le tappe fondamentali della sua ricerca, evidenziando il contributo dei ricercatori italiani alla conoscenza dell'interazione di complessi metallici, in particolare di platino(II), con il DNA.

Di particolare interesse, per le implicazioni di carattere applicativo e sociale, sono risultati gli studi condotti da ricercatori dell'Università di Torino relativi all'uso clinico di complessi paramagnetici di

lantano(III), come di una nuova classe di mezzi di contrasto che agiscono da Chemical Exchange Saturation Transfer (CEST) agents; questa nuova classe di composti presenta proprietà non riscontrate nei complessi paramagnetici di gadolinio(III), studiati dagli stessi ricercatori. La sessione dedicata alla Bioinorganica si è avvalsa anche del contributo di Paola Turano, a cui è stata conferita la Medaglia Raffaello Nasini. Nella sua Conferenza, la prof. Turano, che opera al CERM dell'Università di Firenze, ha evidenziato, facendo riferimento allo sviluppo delle conoscenze sul citocromo c e sulle proteine paramagnetiche, l'apporto che la strumentazione NMR può fornire agli studi di biologia strutturale. Il citocromo c contiene ferro(III), in basso spin, nella forma ossidata e ferro(II) diamagnetico, nella forma ridotta; mediante studi NMR è stato possibile correlare e caratterizzare, in soluzione, le due forme redox, collegarle alla stabilità della proteina, chiarire i fattori strutturali che modificano la proteina da electron-transfer a carrier di ossigeno. L'autore ha anche illustrato il procedimento che ha permesso di chiarire la struttura in soluzione della forma alcalina del citocromo c e definire la flessibilità della proteina.

Uno dei momenti più attesi, nei più recenti Congressi della Divisione di Chimica Inorganica, è stato il conferimento della Medaglia Luigi Sacconi ad uno studioso di fama internazionale che abbia fornito contributi significativi allo sviluppo della chimica inorganica.

Quest'anno l'ambito riconoscimento è stato assegnato a Luis Oro, dell'Università di Saragozza. La Conferenza di Oro, "Hydrido Iridium Triisopropylphosphine Complexes", ha evidenziato la notevole versatilità del complesso idrurico $[\text{IrH}_2(\text{P}i\text{Pr}_3)(\text{NCCH}_3)_3]\text{BF}_4$ ad agire da catalizzatore di idrogenazione ed a fornire informazioni molto utili per la comprensione del meccanismo di alcune reazioni catalitiche, condotte nelle condizioni di idrogenazione; questa prerogativa

F. Faraone, Presidente della Divisione di Chimica Inorganica.

del complesso idrurico di iridio è stata correlata alla presenza di tre siti di coordinazione disponibili. Nella sua ampia trattazione, il relatore ha illustrato il percorso di alcune reazioni tipiche della chimica organometallica, evidenziando la natura degli intermedi ed identificando altri possibili cammini di reazione che competono con la reazione di idrogenazione catalitica.

Numerosi sono risultati i contributi delle sessioni "Chimica organometallica" e "Reattività e catalisi"; i lavori di sintesi sono stati generalmente indirizzati verso nuove classi di composti che possono presentare delle peculiarità o per la loro reattività ed attività catalitica o per particolari proprietà strutturali. In questa ottica sono da considerare i contributi sulla sintesi di diidruo-complessi di rutenio contenenti fosfine tripodali, di metallacarborani polinucleari in cui si evidenzia comunicazione elettronica tra i diversi centri, di complessi binucleari di rutenio o di ferro contenenti leganti insaturi generati per addizione di acetiluri a nitrili ed immine coordinate. Tra i contributi nel settore della catalisi, si inserisce nelle prospettive della "green chemistry" l'utilizzazione di metanolo (o altri alcoli) sotto pressione di CO_2 , o CO_2 supercritico, in presenza di $[\text{Nb}(\text{OR})_4(\text{OC}(\text{O})\text{OR})]$ ($\text{R}=\text{Me}$, Et , allile) come catalizzatore, per ottenere dialchilcarbonati. Gli stessi autori hanno presentato dei risultati alquanto interessanti sulla sintesi di carbonati otticamente attivi per carbossilazione di epossidi in forma enantiopura, o in miscela racemica, in presenza di composti di $\text{Nb}(\text{V})$ e $\text{Nb}(\text{IV})$; la reazione è molto selettiva e procede, in presenza di Nb_2O_5 e di epossidi in forma enantiopura, con totale ritenzione di configurazione.

Molto attuale, alla luce delle nuove disposizioni in materia, la comunicazione che si muove nell'ottica di sviluppare metodologie idonee a ridurre il contenuto di zolfo nei combustibili. Gli autori hanno trovato che il dibenzotiofene (DBT) ed il dibenzotiofene sulfone (DBTO_2) possono essere ossidati a dibenzotiofene sultone (DBTO_3) con H_2O_2 o monopersolfato in presenza di metallo-sulfotalcianina (MPCs), in cui il metallo può essere rutenio, cobalto o ferro. L'ossidazione è quantitativa ed il DBTO_3 subisce idrolisi trasformandosi in 2-(2'-idrossibifenile) sulfonato, che si trasforma in idrossibifenile ed acido solforico.

A tenere la Paolo Chini Memorial Lecture è stato invitato Pierre Braunstein, dell'Università di Strasburgo. Già il titolo, "Metal ligand synergism in bimetallic complexes and clusters" stabilisce una continuità ideale tra lo scienziato, prematuramente scomparso, ed i contenuti della Lecture. Il relatore ha dimostrato l'utilità dell'impiego di leganti emilabili nella sintesi di complessi bimetallici, soffermandosi particolarmente sull'uso di leganti siliati. Nella seconda parte della conferenza, il relatore ha presentato nuove ed utili strategie che possono essere impiegate nell'utilizzo di cluster nella catalisi eterogenea e nei materiali; i casi presi in esame prevedono l'ancoraggio di cluster di cobalto o di platino o di colloidali di oro su materiali del tipo MCM-41 e all'interno di nanopori di membrane di allumina usando, come leganti, difosfine funzionalizzate con gruppi alcossisililici. La caratterizzazione mediante TEM delle nanoparticelle metalliche disperse, ottenute dopo trattamento termico controllato, ha indicato la possibilità di nuovi campi di applicazione per questi materiali.

Molto diversificati i temi affrontati ed i metodi d'indagine utilizzati nei contributi delle sessioni "Materiali" e "Struttura e modellistica di composti inorganici"; ciò è espressione del ventaglio di competenze maturate e del fermento di idee in questi settori che aprono ampie e nuove prospettive alla chimica inorganica. Molto ricca di spunti di ricerca originale, la sessione Poster.

In conclusione: un Congresso che esalta la capacità dei chimici inorganici italiani di cogliere gli aspetti innovativi della ricerca, in questo settore disciplinare, e di rimodulare, in una nuova prospettiva, i processi di formazione delle giovani leve.

VIII Scuola Nazionale per Dottorandi su "Chimica dei materiali inorganici"

Le scuole organizzate annualmente dalla Divisione di Chimica Inorganica hanno lo scopo di offrire ai dottorandi che svolgono la loro tesi nell'ambito della chimica inorganica un'ampia ed aggiornata panoramica delle principali linee di ricerca sviluppate nel settore. Nei tre anni di dottorato, viene data la possibilità di frequentare tre scuole su argomenti diversi (Chimica dei materiali, Chimica organometallica, Chimica bioinorganica) che ampliano la loro formazione fornendo una visione ad ampio spettro delle numerose applicazioni della chimica inorganica. Quest'anno l'argomento affrontato dalla VIII Scuola Nazionale per Dottorandi, tenutasi dal 21 al 25 settembre 2003 a Sestri Levante (Genova), piacevole cittadina della Riviera Ligure di Levante, è stato "Chimica dei materiali inorganici". I partecipanti sono stati 58. L'organizzazione della scuola ha previsto 11 lezioni, una sessione di comunicazioni orali (in cui i dottorandi iscritti all'ultimo anno del ciclo hanno esposto i risultati delle loro ricerche) e due sessioni poster (dove i partecipanti hanno avuto la possibilità di discutere con i colleghi e i docenti i risultati del loro lavoro). Le comunicazioni orali, tenute dai dottorandi, sono state 7 e i poster 26, suddivisi in due sessioni.

Le lezioni tenute da docenti di varie università italiane, esperti nel settore specifico della chimica dei materiali inorganici, sono state: Materiali inorganici nelle celle a combustibile per auto elettriche (G. Alberti), Materiali inorganici lamellari e loro applicazioni nella chimica dell'idrogeno (U. Costantino), Processi di modificazione superficiale in plasma a bassa pressione: aspetti fondamentali e recenti sviluppi in campo biomedicale e altre applicazioni (P. Favia), Cristalli liquidi e loro applicazioni in dispositivi elettroottici (M. Ghedini), Nanocompositi con interessanti proprietà magnetiche (G. Ennas), Struttura superficiale di materiali catalitici (G. Busca), Nanosistemi funzionali a base di metalli e ossidi da sintesi molecolari innovative (E. Tondello), Aspetti di base del processo MOCVD (I.L. Fragalà), Sistemi intermetallici e loro applicazioni (L. Battezzati), Magnetici molecolari (D. Gatteschi) e Modellizzazione termodinamica nella progettazione di materiali (G. Cacciamani).

Premio per la migliore tesi di Dottorato di Ricerca nel settore della Chimica Inorganica (XV Ciclo)

La Divisione di Chimica Inorganica premia la migliore tesi di dottorato in Chimica Inorganica in occasione dell'annuale Congresso della Divisione. Quest'anno, la Commissione, nominata dal Consiglio Direttivo della Divisione, ha indicato quali vincitori ex-aequo del Premio i dottori Aldo Arrais, dell'Università di Torino, e Serena De Negri, dell'Università di Genova. I vincitori hanno ritirato il Premio e tenuto una short-pleinary, in occasione del XXXI Congresso della Divisione. Aldo Arrais ha presentato uno studio del comportamento di sistemi aromatici polinucleari nei confronti di cationi metallici appartenenti alla prima serie di transizione. Il lavoro si sviluppa prendendo in esame sia la sintesi sia la caratterizzazione spettroscopica dei nuovi composti; quest'ultima è la parte fondamentale che conferisce a questo lavoro un carattere altamente innovativo.

Il lavoro presentato da Serena De Negri affronta uno studio sistematico delle proprietà costituzionali di una vasta serie di leghe intermetalliche contenenti alluminio, magnesio e proporzioni diverse di metalli delle terre rare. Gli studi strutturali sono spesso affiancati da ottimizzazioni termodinamiche dei diagrammi di stato ternari delle leghe studiate. Una parte del lavoro studia le proprietà elettrochimiche, confrontando i sistemi binari Al/Mg con quelli arricchiti da un terzo componente del blocco 4f, nella fattispecie erbio. Gli studi elettrochimici dimostrano l'effetto positivo che la presenza di erbio esercita verso la resistenza alla corrosione.

La Chimica organica nel 2003

di Stefano Maiorana

L'attività della Divisione di Chimica organica ha avuto il suo apice nel corso del Congresso nazionale, svoltosi a giugno, in cui si sono ben evidenziate le sue caratteristiche di scienza interdisciplinare e fatto il punto sullo stato dell'arte della chimica organica nel momento attuale.



Il congresso della Divisione di Chimica Organica ha avuto inizio con un'illustrazione dei criteri di impostazione dell'attività scientifica del convegno. Sono state seguite 3 linee guida:

- 1) organizzazione di sessioni in collaborazione con altre divisioni;
- 2) coinvolgimento attivo della componente industriale chimica;
- 3) presenza di due giovani ricercatori stranieri, uno spagnolo e un francese, nell'ambito di un accordo di scambio con la Divisione di Chimica Organica delle Società Chimiche di Spagna e Francia;
- 4) organizzazione di una sessione dedicata a comunicazioni flash per consentire ad un certo numero di giovani di esporre brevemente (5 minuti) i risultati delle loro ricerche facendo riferimento ad un poster.

Elemento saliente del convegno sono state le Conferenze Plenarie dei vincitori delle Medaglie assegnate dalla Divisione e cioè Nina Bero-va, vincitrice della medaglia "P. Pino", Gianfranco Pedulli vincitore della medaglia "A. Mangini", Lucio Merlini, vincitore della medaglia "A. Quilico" e Gianluca Farinola, vincitore della medaglia "G. Ciamician"; a Franco Sannicolò è stato assegnato un premio per le sue ricerche nel campo della catalisi che hanno portato ad applicazioni industriali. Inoltre si è tenuta la conferenza di J.M. Stirling (Sheffield University, UK), nominato socio onorario della SCI su proposta della Divisione di Chimica Organica.

La giornata di martedì 24 giugno è stata organizzata in collaborazione con la Divisione di Chimica Farmaceutica, e ha avuto per titolo: Molecole biologicamente attive. Diversità chimica e progettazione razionale. Oratori di grande rilievo si sono alternati in comunicazioni di grande interesse la cui utilità è stata anche, al di là del contenuto scientifico, di mettere in risalto le diverse metodologie di approccio a problemi simili da parte dei chimici organici e dei chimici farmaceutici; un terreno di potenziale collaborazione di grande interesse, per discipline che spesso hanno obiettivi simili.

A parte le comunicazioni da 20 minuti, tutte molto buone, un'impronta di elevata qualità è stata data dalle comunicazioni da 30 minuti che, per la Divisione di Chimica Organica, sono state tenute su invito da Giovanni Appendino (Università del Piemonte Orientale, Novara) e da Cesare Gennari (Università di Milano).

La giornata del 25 giugno ha avuto per titolo "La chimica organica nell'industria italiana di oggi". Di grande professionalità le conferenze di Paolo Piccardi (Isagro Ricerca, Novara) e di Luciano Lattuada (Bracco Imaging, Milano). Chiara l'impressione del grande fascino e dell'importanza della ricerca industriale di alto livello, capace di co-

niugare le migliori e più sofisticate conoscenze scientifiche con le esigenze della competitività internazionale e della salvaguardia ambientale; un esempio importante per ricercatori giovani e meno giovani. Nel pomeriggio del giovedì 26 si sono tenute le attività comuni delle Divisioni di Chimica Organica e Chimica Inorganica coordinate dal Gruppo Interdivisionale di Chimica Organometallica, presieduta da Sandro Cacchi dell'Università di Roma. Tutte le comunicazioni sono state di alto livello e hanno dimostrato le potenzialità della chimica organometallica nella sintesi stereoselettiva, nella chimica di coordinazione e catalisi e nel nuovo campo della bioorganometallica, una disciplina emergente da cui si attendono spunti di novità nell'ottenimento di nuovi prodotti biologicamente attivi.

Le comunicazioni flash hanno avuto un elevato gradimento (testimoniato dall'esito di un'indagine tramite questionario) confermando le grandi capacità di molti giovani, emerse anche lungo tutto il convegno dalle molte comunicazioni orali ad essi affidate.

Di grande interesse a livello scientifico, come già detto, le conferenze dei vincitori di medaglie, tutte ben meritatamente assegnate. In generale dal Convegno divisionale sono emerse in modo preciso alcune tendenze focalizzate su filoni di ricerca di grande importanza anche a livello internazionale. La chimica organica è certamente oggetto di ricerca di base (metodologie di sintesi, meccanismi di reazione, calcoli teorici), non potrebbe essere altrimenti e deve essere così, ma, nei suoi aspetti sintetici ed analitici, si sta sempre più focalizzando su obiettivi di potenziale interesse applicativo quali i materiali molecolari e polimerici, le nanotecnologie, le applicazioni chimiche delle biotecnologie e il riconoscimento molecolare. Le tecniche spettroscopiche classiche, IR, UV, NMR, Massa e le tecniche elettrochimiche evolvono rapidamente verso applicazioni sofisticate e su molecole complesse nel campo del riconoscimento molecolare e di determinazione di configurazioni di stereocentri.

Dal convegno è emerso un panorama di ricerca di alto livello con strumentazioni di avanguardia ed elevate competenze scientifiche che, a mio avviso, richiederebbe nel nostro Paese un'organizzazione strutturale nazionale adeguata al costo delle apparecchiature e in rapporto alla loro disponibilità attuale sul territorio nazionale oltre che alle necessità reali. Ma questo è un discorso di vecchia data che, come altri pensieri sullo stato economico e organizzativo della ricerca italiana viene da lontano e porterebbe lontano. Noi Professori universitari non siamo esenti da colpe, non me ne vogliano i colleghi, mi ci metto anche io. Guardare al prossimo Convegno Divisionale è guardare al futuro, immaginandolo sempre più interessante ed avvincente, ma senza dimenticare che il futuro più che immaginato andrebbe programmato.

S. Maiorana, Presidente della Divisione di Chimica organica della Sci.

La chimica dei sistemi biologici

Tematiche emergenti e futuri sviluppi

di Gian Maria Bonora

Il XXI Congresso della Società Chimica Italiana ha rappresentato per la Divisione di Chimica dei Sistemi Biologici un'occasione per far conoscere a tutto il mondo chimico italiano le attività scientifiche nelle quali i propri Soci sono maggiormente attivi. Dalle relazioni attività/struttura degli acidi nucleici alla scoperta di nuovi vaccini, dalle strutture tridimensionali delle proteine alle applicazioni biotecnologiche dei peptidi, dai calcoli strutturali alle indagini microscopiche su singole macromolecole i campi di ricerca rappresentati sono un esempio della profonda interdisciplinarietà che caratterizza la Divisione.

L'attività della Divisione di Chimica dei Sistemi Biologici della Società Chimica Italiana ha avuto durante il corrente anno la sua massima espressione nell'ambito del XXI Congresso Nazionale della SCI tenutosi a Torino lo scorso giugno.

I lavori della Divisione si sono sviluppati in una serie di giornate dedicate alle tematiche che rappresentano le diverse "anime" dei Soci della Divisione. Va ricordato che la Divisione di Chimica dei Sistemi Biologici è una Divisione multidisciplinare che, fondando le sue basi sulle scienze chimiche, costruisce il suo edificio aprendosi a molte discipline confinanti quali la biochimica, la biologia molecolare, le biotecnologie che, almeno nel panorama scientifico italiano e a differenza di molte realtà internazionali, non sono tradizionalmente ritenute di pertinenza della comunità chimica. A questo proposito è opportuno ricordare che il Premio Nobel per la Chimica del 2003 è stato assegnato ad un biochimico e ad un biofisico, rispettivamente, per i loro studi sulla scoperta dei canali che permettono alle membrane cellulari di lasciare entrare o uscire sostanze indispensabili come l'acqua e i sali, mentre nel passato diversi sono stati i premi assegnati a ricercatori che hanno dato contributi determinanti in campi all'interfaccia tra la chimica e le scienze biologiche. È quindi evidente come il Premio Nobel di questo anno ben figuri tra gli interessi rappresentati nella nostra Divisione; e questo è estremamente importante per tutti i nostri Soci che, dividendosi tra mondo accademico ed imprenditoriale, amano operare ai confini tra chimica, fisica, matematica, biologia, farmacologia ed altro.

G.M. Bonora, Università di Trieste - Presidente della Divisione di Chimica dei Sistemi Biologici - <http://molsim.sci.univr.it/sci/>.

Nuove frontiere degli acidi nucleici

Tornando ai lavori del Congresso e alle tematiche che maggiormente sono emerse durante i lavori va ricordato che la prima giornata è stata dedicata alle "Nuove frontiere degli acidi nucleici". Lo studio infatti degli acidi nucleici sia dal punto di vista sintetico sia strutturale e di attività, rappresenta senza dubbio una parte importante dell'attività scientifica all'interno della Divisione.

Questa sessione è stata dedicata alla memoria di Claude Hélène, lo scienziato francese prematuramente scomparso quest'anno e che ha rappresentato per tutti gli studiosi degli acidi nucleici, oltre che per il sottoscritto, un punto di riferimento costante ed uno stimolo inesauribile. La conferenza plenaria di Carine Giovannangeli, del Museo di Storia Naturale di Parigi, collega di Hélène, ha avuto come oggetto i più recenti studi sulle formazioni *in vitro* ed *in vivo* di triple eliche da parte di oligonucleotidi sintetici e bersagli naturali di Dna, studi dei quali, appunto, Claude Hélène è stato il principale progenitore. I successivi interventi sono stati tenuti da Luigi Xodo, che ha trattato delle strategie molecolari per la regolazione genica; Michela Varra, ancora sulla sintesi e caratterizzazione di sequenze di Dna a tripla elica, Roberto Corradini, sugli analoghi poliammidici di acidi nucleici, Luisa Tondelli, sull'utilizzo di nanosfere di metacrilato per il rilascio di oligonucleotidi antisense e infine Giampaolo Zuccheri, sulle possibilità aperte dal microscopio a forza atomica nello studio delle proprietà strutturali degli acidi nucleici.



Applicazioni industriali nella chimica dei sistemi biologici

La seconda sessione si è invece espressamente rivolta alle "Applicazioni industriali nella chimica dei sistemi biologici". Questa Divisione infatti desidera rappresentare la voce chimica ufficiale nel campo delle applicazioni biotecnologiche, considerato che tali applicazioni non possono prescindere dal contributo fondamentale ad esse dato dalle Scienze Chimiche grazie anche alla crescente interdisciplinarietà che le caratterizza.

La sessione è stata introdotta da Guido Grandi, Chiron Italia, che ha fatto il punto sullo sviluppo di nuovi vaccini nella nuova era post-genomica, sottolineando l'impiego delle nuove strategie "in silico" e l'uso di microarray. Successivamente, Gianluca Fossati, dell'Italfarmaco ha evidenziato l'importanza dello studio di nuove molecole di sintesi ad attività antinfiammatoria presentando i risultati di studi condotti su un idrossammato (SAHA) in grado di inibire in modo potente e selettivo una famiglia di enzimi noti come istone deacetilasi. In particolare è stato evidenziato come, dal punto di vista chimico, questa sostanza rappresenti il capostipite di una serie di molecole che possono essere sintetizzate in modo semplice e veloce e con un'elevata diversità strutturale. Di seguito, Anna Maria Papini ha

dato un chiaro esempio di applicazioni centrate su un glicopeptide di interesse industriale, Alessandro Padova ha descritto l'attività di scoperta di nuove molecole bioattive svolta presso il nuovo centro di ricerca C4T nel quale vengono sviluppate applicazioni chimiche combinatoriali e computazionali. Giovanni Vallini, infine, ha introdotto il problema dell'impiego di sistemi biologici nella risoluzione di problemi di recupero ambientale (bioremediation).

Biostrutture e biofunzioni

Le successive sessioni, riunite sotto il titolo generale di "Biostrutture e biofunzioni" hanno visto, dopo la conferenza plenaria di Annalisa Pastore, del National Institute of Medical Research di Londra, impegnata in studi volti a chiarire la funzione della proteina frataxina, una serie di relazioni scientifiche che si sono praticamente suddivise in due parti dedicate alle proteine da un lato e ai peptidi dall'altro, campi di studio che rappresentano l'attività di gran parte dei Soci della Divisione.

Tra i contributi dedicati al campo delle proteine, la loro caratterizzazione strutturale, dinamica e funzionale, che ha avuto un impulso decisivo dalla lettura del genoma di un numero sempre più crescente di organismi, è stata particolarmente sottolineata. La conoscenza dei genomi permette di fare studi comparativi tra i diversi organismi, permette di localizzare nuove proteine di funzione ancora sconosciuta e possibilmente di correlare la funzione di proteine diverse

con lo scopo finale, grazie al ruolo essenziale del chimico, di avere una comprensione a livello molecolare dei processi fondamentali che stanno alla base della vita. Rilevanti in questa ottica sono state le presentazioni di Roberta Pierattelli, Vito Calderone e Simona Fermani, che hanno illustrato alcuni risultati di caratterizzazione strutturale sia in soluzione sia mediante raggi X.

Mentre la spettroscopia NMR è diventata una tecnica ormai standard per la determinazione di strutture di proteine in soluzione (come è stato riconosciuto dal Premio Nobel 2002 per la Chimica a Kurt Wüthrich), le proteine contenenti ioni metallici costituiscono ancora sistemi "difficili" da caratterizzare a cui non è possibile applicare metodologie standard. Roberta Pierattelli ha presentato alcuni degli avanzamenti più recenti che permettono di affrontare sistemi particolarmente difficili, come le proteine contenenti rame(II). Simona Fermani ha mostrato come, mediante diffrazione a raggi X, sia possibile, attraverso la caratterizzazione di addotti proteina-substrato, capire il meccanismo catalitico e i fattori che lo determinano. Vito Calderone, attraverso caratterizzazioni strutturali a raggi X di una fosfatasi e il confronto con proteine di fold simile, anche se di sequenza non omologa, è stato in grado di interpretare il processo catalitico e la specificità verso il substrato.

Per quanto concerne i peptidi è stato illustrato da Giorgio Colombo come l'uso dei metodi computazionali consenta di ottenere importanti informazioni sulla correlazione tra sequenza primaria e struttura tridimensionale di un peptide o una proteina. La comprensione di tale correlazione potrebbe consentire di progettare sequenze peptidiche la cui conformazione (e quindi anche la bioattività) sia nota a priori. Anche per quanto riguarda i peptidi Giuseppe Digilio ha chiarimen-

te dimostrato ancora che le moderne tecniche NMR, grazie anche all'uso di spettrometri sempre più potenti e versatili, si stanno dimostrando mezzi insostituibili per ottenere informazioni strutturali su macromolecole biologiche. Per quanto riguarda invece gli aspetti sintetici, la diffusa applicazione negli ultimi dieci anni dell'approccio combinatoriale e delle sintesi parallele hanno offerto interessanti opportunità per individuare in tempi brevi peptidi dalle potenziali applicazioni in campo biologico, medico o farmacologico come descritto da Menotti Ruvo. Originale e intrigante l'ipotesi offerta da Marco Crisma secondo la quale peptidi composti da amminoacidi non proteici di origine extraterrestre, giunti sulla Terra in forma enantiomericamente arricchita, potrebbero avere costituito l'innescò dell'omochiralità che si riscontra nelle macromolecole biologiche.

Di notevole interesse le due presentazioni riguardanti i peptidi ad attività antibatterica. Renato Gennaro ha chiaramente indicato come questi peptidi potrebbero costituire una valida alternativa agli antibiotici attualmente in uso e contro i quali alcuni ceppi batterici hanno sviluppato resistenza. Uno di questi peptidi, il Bac7, identificato nei leu-

cociti, è stato utilizzato per legare in maniera specifica e quindi individuare le proteine intracellulari che potrebbero costituire l'obiettivo della sua azione.

In un secondo tipo di esperimenti il Bac7 è stato utilizzato per isolare ceppi batterici resistenti. Questi studi, oltre a contribuire a comprendere il meccanismo d'azione del Bac7, dovrebbero portare allo sviluppo di nuovi e più efficaci anti-

biotici. Sulla stessa linea di ricerca si colloca lo studio di Lorenzo Stella sugli studi

fotofisici compiuti su analoghi della tricogina, peptide che appartiene all'ampia classe dei permeabilizzatori di membrane.

Opportune sonde fluorescenti, legate covalentemente al peptide, hanno consentito di studiare in dettaglio gli equilibri di aggregazione delle molecole peptidiche e la loro ripartizione tra ambiente acquoso e membrana. Tale fattore, sin qui poco indagato, sembra avere un ruolo fondamentale nell'azione antibiotica dei peptidi.

Tutti questi argomenti sono stati ulteriormente evidenziati nella presentazione dei poster che ha fatto da cornice all'attività congressuale della Divisione, attività che si è anche manifestata durante il corrente anno in ulteriori partecipazioni legate alle biotecnologie (Bionova-Padova) e alle metodologie applicative (Tor Vergata-Roma).

In conclusione, quale neo presidente della Divisione, penso di poter affermare come anche durante il 2003 si sia riusciti a continuare l'attività portata avanti con grande efficacia dalla precedente presidenza. In particolare l'estensione degli interessi scientifici di base allo sviluppo di applicazioni industriali di interesse biotecnologico rappresenta un necessario passo avanti per ampliare ulteriormente la base di discussione e di interesse di questa Divisione multidisciplinare. Ancora una volta infatti è bene sottolineare che essa raffigura un indispensabile punto di collegamento tra la cultura chimica, base comune della Società Chimica Italiana, e gli aspetti delle "life sciences" che sempre di più rappresentano un fondamentale punto di sviluppo del mondo scientifico. In altre parole, è bene ricordare che solo attraverso una sempre più ampia interdisciplinarietà sarà possibile superare le tradizionali aree di "competenza" e relativi "settori disciplinari" che appaiono sempre più privi di un reale significato scientifico e contribuire quindi allo sviluppo di nuove aree sia nella ricerca scientifica di base che in quella applicata.

