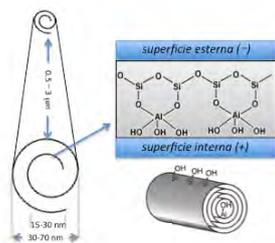


Siamo due giovani chimiche con tanta passione ed una rubrica in cui raccontare e condividere quello che ci colpisce nel mondo della chimica computazionale e della chimica organica nei suoi molteplici aspetti. Data la multidisciplinarietà degli argomenti trattati, che riteniamo sia un valore aggiunto importante, questa rubrica sarà suddivisa in due parti principali: una sarà inerente alle tematiche della modellistica molecolare di varia natura, dal drug design alla dinamica molecolare; la seconda parte tratterà invece gli studi più recenti e innovativi di materiali avanzati per potenziali applicazioni nel campo dell'energia e della catalisi, con particolare attenzione agli aspetti sintetici, ovvero alla messa a punto e/o all'ottimizzazione di reazioni di sintesi organica finalizzate alla funzionalizzazione di nuovi (nano) materiali. In ognuna delle due sezioni sarà presentata una rilettura critica di due o tre lavori, che ci hanno incuriosito e che, a nostro avviso, possono interessare anche un lettore non necessariamente del settore.

Le proteine e l'acqua

Martin Gruebele, associate editor della nota rivista JACS (Journal of American Chemical Society), ci lascia alla fine del 2014 con una selezione di lavori sulla dinamica delle proteine. Grazie a tecniche sperimentali sempre più all'avanguardia capaci di studiare anche fenomeni che avvengono nella cellula stessa (come la tecnica FRET, single-molecule Förster resonant energy transfer), e a simulazioni di dinamica molecolare capaci di descrivere sia fenomeni dell'ordine dei millisecondi che, in modo grezzo o coarse grain, sistemi proteici di dimensioni notevoli, teoria ed evidenza sperimentale sembrano destinati ad allinearsi ed integrarsi con sempre maggiore successo. Oltre alla proteina in sé, occorre anche avere uno sguardo attento su cosa succede all'acqua che la circonda. È noto come l'acqua sia molto più di un mero spettatore dei fenomeni di aggregazione, folding e riconoscimento delle proteine. In un recente lavoro sulla dinamica delle molecole

di acqua (V. Conti Nibali, M. Havenith, *J. Am. Chem. Soc.*, 2014, **136**(37), 12800, <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ja504441h>),



grazie a simulazioni di dinamica molecolare accoppiati a studi con spettroscopia Terahertz, si è osservato come sia nel caso delle proteine con proprietà di anticongelamento (AFPs) che nel processo di riconoscimento substrato-proteina, il moto delle molecole d'acqua sembra essere guidato da un gradiente diretto verso i siti attivi o funzionali della proteina (che vengono definiti un hydration funnel). Oltre quindi ad un'interazione diretta, o short range, sembra esserci anche un accoppiamento long range proteina-acqua. Anche in un articolo di Kubarych (*J. Am. Chem. Soc.*, 2014, **136**(1), 188, <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ja407858c>), quando le proteine si trovano in situazioni di crowding, o alta densità, come all'interno di un lisozoma, la loro sfera di solvatazione acquosa può essere perturbata fino a 3-4 nm dalla superficie della proteina. Anche la dinamica delle molecole di acqua è influenzata dal fenomeno e si osserva un rallentamento in prossimità delle proteine crowded.

Nanomateriali

In questa prima rubrica, vorrei richiamare l'attenzione dei lettori su un materiale argilloso nanotubolare di origine naturale, i nanotubi di Halloysite (HNTs), che rappresentano una "stella nascente" nella chimica dei materiali. Scoperti nel XVIII secolo dal geologo belga Omalius d'Hallo, oltre ad essere economici e non tossici, gli HNTs sono alluminosilicati con caratteristiche strutturali molto particolari (Fig. 1), tra cui una diversa composizione della superficie interna da quella esterna che rende possibile sfruttare le diverse affinità di una sostanza per un ambiente piuttosto che un altro e controllare così con più selettività dove essa andrà a collocarsi sulla nanostruttura. Molteplici sono quindi le loro

applicazioni: in ambito biologico (rilascio controllato di farmaci e drug delivery), nell'assorbimento irreversibile di inquinanti dall'ambiente, nella chimica dei polimeri e in catalisi (D. Rawtani, Y.K. Agrawal, *Rev. Adv. Mater. Sci.*, 2012, **30**(3), 282, www.ipme.ru/e-journals/RAMS/no_33012/08_rawtani.pdf). Sebbene ancora agli albori, lo studio di nanocompositi ibridi organici/inorganici derivanti dall'immobilizzazione di nanoparticelle metalliche su HNTs funzionalizzati con linker organici rappresenta un campo di indagine molto promettente in catalisi. Tra i numerosi lavori apparsi nel 2014, l'ancoraggio di nanoparticelle di Ag sulla superficie esterna degli HNTs funzionalizzata con un linker amminosilano (S. Jana, *RSC Adv.*, 2014, **4**, 34435, <http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2014/ra/c4ra03684k#!divAbstract>), o la funzionalizzazione della superficie interna degli HNTs con nanorods di Ag e quella esterna con nanoparticelle di Lys-Fe₂O₃ [W. Wang, *RSC Adv.*, 2014, **4**, 39439, <http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2014/ra/c4ra05892e#!divAbstract>] hanno permesso di ottenere degli ottimi sistemi catalitici, in termini di efficienza e riciclabilità, per la riduzione di composti nitro-aromatici ad aniline con NaBH₄. Da sottolineare che il sistema superparamagnetico a "sandwich" Ag/HNTs/Fe₂O₃ di Wang permette il recupero del catalizzatore utilizzando una semplice calamita. Infine, Yang dimostra come l'impiego di linker organosilatici per immobilizzare nanoparticelle metalliche (Pt, Au) agli HNTs fornisca sistemi nanocompositi con performance catalitiche significativamente migliori rispetto ai sistemi costituiti da nanoparticelle solo adsorbite su HNTs, in quanto l'immobilizzazione tramite linker organico permette di ottenere una dispersione omogenea ed un loading maggiore della nanoparticella sugli HNTs, evitando fenomeni di aggregazione (Y. Zhang *et al.*, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2014, **53**(13), 5507, <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ie404326j>).

SILVIA CAUTERUCCIO, MONICA CIVERA

DIPARTIMENTO DI CHIMICA
UNIVERSITÀ DI MILANO

SILVIA.CAUTERUCCIO@UNIMI.IT
MONICA.CIVERA@UNIMI.IT