

## **EQUILIBRI DI COMPLESSO-FORMAZIONE IN SOLUZIONE TRA METALLI E LEGANTI DI INTERESSE BIOLOGICO E/O FARMACOLOGICO**

Molti metalli sono coinvolti nei processi biologici che garantiscono il sostentamento della vita animale e vegetale. Tra questi i cosiddetti metalli "minori", presenti in tracce ma facenti parte di molecole fondamentali per la vita, quali metallo-enzimi e metallo-proteine. La formazione di tali complessi è regolata da un gran numero di fattori ambientali tra i quali anche la competizione di altri leganti e ioni metallici. È importante quindi conoscere il comportamento di questi sistemi in condizioni dinamiche, quali quelle che si verificano in soluzione, nei fluidi biologici.

### ***OBIETTIVI***

I principali obiettivi di questa linea di ricerca sono i seguenti: a) misura delle costanti acido/base dei leganti considerati; b) definizione del modello di speciazione relativo ai complessi formati tra i leganti e i metalli oggetto di indagine; c) calcolo di diagrammi di distribuzione e di competizione; d) studio della struttura in soluzione dei principali complessi formati. Tale schema di indagine è stato recentemente applicato sia nel campo degli equilibri metallo-peptide (usati come modelli per i complessi metallo-proteina) che nello studio di potenziali farmaci per terapia chelante (impiegati nella terapia di intossicazioni da metalli) nonché di complessi macro-chelati come possibili candidati come mezzi di contrasto in diagnostica per immagini.

### ***STRUMENTAZIONE E METODI***

Il metodo largamente più utilizzato per lo studio di equilibri in soluzione che coinvolgono molecole con proprietà acido-base è la potenziometria con elettrodo a vetro. In casi particolari possono essere utilizzati elettrodi di altro tipo, ad es. elettrodi reversibili al metallo. Il laboratorio dispone di due titolatori automatici, composti ciascuno da una microburetta motorizzata ed un pHmetro di precisione gestiti da calcolatore. Al fine di completare la caratterizzazione termodinamica degli equilibri in soluzione, il laboratorio dispone di un microcalorimetro isoperbolico a titolazione (Tronac, mod. 450). Per ottenere poi informazioni sulla struttura delle specie formate vengono utilizzate diverse tecniche spettroscopiche, tra le quali la spettrofotometria UV-Vis, la spettrofotometria di dicroismo circolare, le spettroscopie EPR ed NMR. Tra le tecniche disponibili in Dipartimento, vengono pure largamente utilizzate: la spettrometria ESI-MS, per confermare la stechiometria delle specie in soluzione, e la diffrattometria ai raggi X per ottenere la struttura allo stato solido di cristalli dei complessi. In collaborazione col Dipartimento di Scienze della Vita e Biotecnologie vengono eseguiti test di attività biologica in vitro dei complessi sintetizzati.

### ***DISCIPLINE COINVOLTE***

Chimica analitica, Chimica fisica, Chimica bioinorganica, Chimica organica, Biochimica.

### ***GRUPPO DI LAVORO***

Maurizio Remelli  
Alberto Cavazzini  
Luisa Pasti  
Nicola Marchetti  
Maria Chiara Pietrogrande  
Catia Contado

### ***COLLABORAZIONI***

Intra moenia: Prof. Valerio Bertolasi, Prof. Remo Guerrini, Prof. Riccardo Gavioli. Extra moenia: Prof. H. Kozłowski (Università di Wroclaw, PL), Prof. D. Valensin (Università di Siena), Prof. M.A. Zoroddu (Università di Sassari), Prof. G. Crisponi (Università di Cagliari), Dr. M. Tegoni (Università di Parma).