

INTERAZIONE E RICONOSCIMENTO NEI CRISTALLI MOLECOLARI

I cristalli molecolari sono sistemi modello ideali per lo studio delle forze di interazione molecolare che agiscono nei diversi livelli di aggregazione della materia e nei processi di riconoscimento supramolecolare rilevanti in chimica, scienza dei materiali e biochimica delle interazioni farmaco-recettore ed enzima-substrato. Lo studio dell'impacchettamento cristallino di estese serie di cristalli (progettati ad hoc o derivati da indagini sistematiche su database cristallografici e possibilmente integrati da dati termodinamici, spettroscopici e di emulazione computazionale) permette di identificare le forze di riconoscimento intermolecolare che connettono le molecole in aggregati stabili. L'analisi dei dati viene condotta con metodi LFER (linear free-energy relationships) e metodi di correlazione strutturale finalizzati alla mappatura dei cammini di reazione ed allo studio delle relazioni struttura-proprietà.

OBIETTIVI

(a) Studio sistematico del legame ad idrogeno, sua classificazione in classi chimiche e formulazione di modelli generali capaci di prevederne le proprietà, con particolare riguardo a struttura ed energetica. (b) Aspetti applicativi del legame ad idrogeno forte in chimica, biochimica e scienza dei materiali. (c) Studio sistematico delle interazioni di trasferimento di carica nei cristalli molecolari. Loro importanza nel determinare l'impacchettamento cristallino e nel costituire una base per una teoria generale delle interazioni molecolari. (d) Applicazioni all'ingegneria cristallina delle conoscenze acquisite nel campo delle interazioni molecolari, con particolare riguardo ai materiali funzionali ed ai cocristalli di interesse farmaceutico.

STRUMENTAZIONI E METODI

Uso sistematico di database cristallografici e termodinamici. Simulazione di molecole modello con calcoli quantomeccanici ab initio e DFT. Preparazione di cristalli e cocristalli molecolari di importanza per lo studio di interazioni molecolari specifiche e loro determinazione strutturale per diffrazione di raggi X a temperatura ambiente ed a bassa temperatura.

DISCIPLINE COINVOLTE

Chimica strutturale, Chimica fisica, Chimica generale

GRUPPO DI LAVORO

Valerio Bertolasi
Paola Gilli