

Relazione attività per la borsa di studio “short term mobility” di Francesco Caruso nel programma “Studio dell’attività antiossidante di chalconi con metodi strutturali quanto-meccanici e di diffrazione ai raggi X”.

Durante il soggiorno al Department of Chemistry del Vassar College si è fatto uso di un diffrattometro di raggi X (Bruker ApexII) per raccogliere dati a bassa temperatura, 125K, di 5 composti chalconi. Questi dati sono stati processati onde ottenere le strutture cristalline e molecolari corrispondenti. In seguito, dalle strutture molecolari si è avviato uno studio teorico onde verificare le possibilità di utilizzo di tali composti come sequestratori (scavenger) di radicali liberi. I radicali idrossile e perossile furono specificamente analizzati facendo uso del programma quanto-meccanico Dmol3 inserito nel sistema Materials Studio 4.4 (Accelrys Inc. San Diego California). In questi studi ci si è indirizzati alla determinazione di spin-density per verificare principalmente i rapporti struttura – attività, nonché la verifica dei minimi di energia e variazione di energia libera del sistema. In particolare il parametro di spin-density è un eccellente indicatore di stabilità dei neo-formati radicali chalconi, avvenuti dopo la neutralizzazione dei radicali idrossile o perossile. I radicali chalconi sono meno dannosi del idrossile o perossile perchè il suo elettrone spaiato ha buone possibilità di delocalizzazione presso i due anelli aromatici, risultando un sistema più stabile. Con questo studio abbiamo verificato le ipotesi di lavoro del programma oggetto della borsa, nel senso che i chalconi possono essere degli ottimi scavenger di radicali liberi, e trovato le migliori condizioni di sostituzione dello schema chalconico onde produrre buoni scavenger. Dagli studi fatti possiamo anticipare che sostituzioni idrossiliche sull’anello B del chalcone sono più efficaci di quelle sull’anello A. Tale rapporto struttura – attività si applicherà per lo sviluppo di chalconi utili ad alleviare le conseguenze di degenerazione dei tessuti nervosi affetti da attacco di radicali liberi, verificati in malattie di Alzheimer o Parkinsons. In seguito alle 3 settimane della borsa si sono inviate 3 comunicazioni al congresso dell’American Chemical Society 10th Annual ACS Undergraduate Chemistry Research Symposium, April 24, 2009, Mount Saint Mary College, Newburgh, (New York) {<http://www.midhudsonacs.org/MHC0209b.pdf>} [1-3]. Nel periodo successivo alla durata della borsa “Short Term Mobility” si sono avviati anche altri studi che hanno portato a una comunicazione al 25-esimo congresso dell’European Crystallographic Meeting, 16-21 August 2009, Istanbul {<http://www.ecm25.org/>} [4]. Nelle 4 comunicazioni si è fatta menzione del contributo del CNR Short Term Mobility esprimendo il ringraziamento corrispondente, ivi allegate. E’ in preparazione un manoscritto per avviare alla pubblicazione dei risultati ottenuti durante il periodo di studio in oggetto.

[1] THEORETICAL DFT STUDIES, CRYSTAL AND MOLECULAR STRUCTURE OF 2',3',4'-TRIHYDROXYCHALCONE DIHYDRATE. Alex. Carlin, Francesco Caruso, Miriam Rossi.

[2] INTERESTING HYDROGEN BONDING PATTERN IN 2,2',5'-TRIHYDROXYCHALCONE HEMIHYDRATE. Gail Nakano, Francesco Caruso, Miriam Rossi

[3] ROLE OF FLUORINE IN DISTORTION FROM PLANARITY OF POLYCYCLIC AROMATIC HYDROCARBONS. Dan Liebowitz, Francesco Caruso, Barbara Zajc, Miriam Rossi

[4] Copper(II)Risedronate: the importance of structure validation on the correct solution. Miriam Rossi, Bruno Demoro, Lucia Otero, Dinorah Gambino, Francesco Caruso.

Firma proponente

Firma fruitore

