

Linee ricerca secondo azione biologica:

1) Inibitori enzimatici

- a) Inibitori di glicosidasi (*diabete, cancro, malattie da virus o del sistema immunitario*) (Brandi, Goti, Giomi) e di glicosiltransferasi (Goti).
- b) Analoghi della geiparvarina come inibitori selettivi delle MAO-B (Chimichi)
- c) Inibitori delle metalloproteasi (*antitumorali*) (Guarna)
- d) Inibitori di isoforme dell'enzima steroidi 5- α -riduttasi (*irsutismo e PCOS*) (Guarna)
- e) Inibitori selettivi delle fosfodiesterasi (PDE) 4 e 5 (*asma, bronchite, vasculopatie periferiche e disfunzioni erettile*) (Dal Piaz)
- f) Inibitori della *casein chinasi 2 (CK2)* (*antineoplastici, antiinfettivi*) (Filacchioni).
- g) Inibitori dell'elastasi dei neutrofili (*antinfiammatori*) (Dal Piaz)

2) Peptidi e Peptidomimetici

- a) β -lattami spirofusi con un anello ciclopropanico (*peptidomimetici*) (Brandi).
- b) Aminoacidi non naturali e dipeptidi per sintesi di peptidi: antagonisti delle integrine, (*antivirali o immunomodulanti*) (Brandi).
- c) Sintesi di scaffold molecolari (*peptidomimetici*) (Guarna).

3) Chemioterapici

- a) Antimetaboliti e farmaci bioriducenti (*antitumorali*) (Menichetti).
- b) Eterocicli azotati come aza-analoghi di illudine (*alchilanti del DNA*) (Brandi)
- c) β -lattami spirofusi con un anello ciclopropanico (*antibatterici, antivirali*) (Brandi).
- d) Analoghi della geiparvarina (*antiproliferativi*) (Chimichi)
- e) Inibitori proteasi (*antitumorali, antinfettivi, antibatterici*) (Guarna)
- f) Mimetici delle integrine (*metastasi tumorali*) (Guarna)
- g) Glucogalloilderivati (*antimicotici*) (Menichetti, Nativi)
- h) Pirazolobenzotriazine citotossiche (*antitumorali, antiprotozoari*) (Bruni)
- i) Modulatore della Multidrug Resistance (MDR) (*antitumorali*) (Gualtieri)
- j) Eterocicli policondensate ad azione antileucemica (Gualtieri).
- k) Peptido-coniugati ad attività citotossica (Menichetti)

4) Ligandi recettoriali

- a) Radioligandi per recettori dopamina, serotonina, DAT, SERT umani (Guarna)
- b) Ligandi recettore delle tachichinine NK2 (Nativi)
- c) Ligandi al recettore benzodiazepinico centrale e periferico (Bruni)
- d) Antagonisti selettivi dei recettori dell'adenosina A₁/A_{2B} (Dal Piaz), A_{2A}/A₃ (*neuroprotettivi*) (Filacchioni)
- e) Antagonisti dei recettori glicina/NMDA, AMPA e Kainato (*neuroprotettivi*) (Filacchioni)
- f) Ligandi dei recettori colinergici a struttura diossolanica e ossatiolanica (Gualtieri)
- g) Bloccanti dei canali del calcio di tipo N (*analgesici*) (Gualtieri)
- h) Modulatore dei canali HCN (*agenti bradicardici*) (Gualtieri)
- i) Ligandi selettivi dei recettori degli estrogeni (Menichetti)
- j) Ligandi dei recettori dei peptici formulati (*antinfiammatori*) (Dal Piaz)

5) Malattie Neurodegenerative

- a) Agonisti ed antagonisti delle neurotrofine NGF (Guarna)
- b) Inibitori proteasi (*malattie neurodegenerative*) (Guarna)
- c) Piperazine e aminopiperidine ad azione nootropica (Gualtieri)
- d) Antagonisti dei recettori A_{2A} ed A₃ dell'adenosina (Filacchioni)
- e) Antagonisti dei recettori glicina/NMDA, AMPA e Kainato (Filacchioni)

6) Immunomodulatori

- a) Derivati Adenine (*immunostimolatori anti-allergici*) (Guarna)

b) Immunostimolanti di natura glicosidica (Nativi)

7) Recettori sintetici

a) Recettori sintetici selettivi di monosaccaridi (Nativi)

8) Antinocicettivi

a) Derivati arilpiperazinilpiridazinonici ad attività antinocicettiva (*uptake catecolammine*) (Dal Piaz)

b) Bloccanti dei canali del calcio di tipo N (*analgesici*) (Gualtieri).

c) Modulatore non peptidici delle proteine G inibitorie (*analgesici*) (Gualtieri).

Molecular Modeling (Gratteri, Melani)

- 1) Recettori periferici e centrali delle benzodiazepine
- 2) Fosfodiesterasi di tipo 4 (PDE4)
- 3) Recettore AMPA
- 4) Recettori sigma
- 5) Recettore nicotinico neuronale
- 6) Glicosil-idrolasi
- 7) MDR (P-gp)
- 8) Studio della modalità di interazioni con il substrato biologico (RNA e DNA) di complessi mono e binucleari di Zn di ligandi macrociclici.
- 9) Complessi micellari e complessi con ciclodestrine
- 10) Analoghi della somatostatina
- 11) Radioligandi derivati dalla biotina
- 12) Parametrazione di campi di forza
- 13) Sviluppo di software specifico per il molecular modeling

Linee ricerca secondo struttura chimica

- 1) Iminozuccheri (Brandi, Goti, Giomi)
- 2) Acidi colici (Chimichi)
- 3) Psoraleni (Chimichi)
- 4) Organosilani, eterocicli solforati, selenosilani (Degl'Innocenti)
- 5) Derivati diossolanici, ossatiolanici (*antivirali, fungicidi*), tiazolidinici (*agenti antitosse e radioprotettivi*) (Degl'Innocenti)
- 6) Eterocicli selenati (ossaselenolani e tiaselenolani: *antiinfiammatori*) (Degl'Innocenti)
- 7) Selenoamminoacidi (Degl'Innocenti)
- 8) Leganti bis-ossazolinici (Giomi)
- 9) Sostanze naturali a struttura eterociclica (Guarna)
- 10) Derivati polifenolici (*antiossidanti*) (Menichetti)
- 11) Pirazolo[5,1-c][1,2,4,]benzotriazine; pirazolo[1,5-a]pirimidine (Bruni)
- 12) Sintesi di glicopeptido mimetici ciclici analoghi della somatostatina, o quali leganti del recettore delle tachichinine-NK2 (Nativi)
- 13) Piridazinoni, arilpiperazinilpiridazinoni e piridazinoni triciclici (Dal Piaz)
- 14) 1,2,4-triazolo[4,3-a]chinossalin-1-oni, 1,2,4-triazolo[1,5-a]chinossaline, pirazolo[3,4-c]chinoline, 3-idrossi-1H-chinazolin-2,4-dioni, 5-oxo-pirazolo[1,5-c]chinazoline, 4-oxo/4-amminochinazoline-4-carbossiammidi, pirido[2,3-e]1,2,4-triazolo[4,3-a]pirazin-1-oni, (Filacchioni)
- 15) Derivati diossolanici, ossatiolanici e ossatiolani 3-ossidi (Gualtieri)
- 16) Aminopiperidine, piperazine (Gualtieri).
- 17) Derivati tropanici (Gualtieri).
- 18) Eterocicli policondensati (Gualtieri).
- 19) 2-Aril-1,4-benzossatiini (Menichetti)
- 20) Benzo[1,4]tiazine (Menichetti)
- 21) Derivati piridazinici mono e polinucleari (Giomi).
- 22) Piridil carbinoli (Giomi)

Linee di ricerca secondo metodologie sintetiche

- 1) Reazioni di enamminoni ed acil chetoni con 1,2-bisnucleofili (Chimichi)
- 2) Sintesi stereoselettive (Degl'Innocenti, Menichetti)
- 3) Chimica verde (Goti)
- 4) Reazioni Etero Diels-Alder (HDA) (Giomi, Menichetti)
- 5) Catalisi enantioselectiva (Giomi, Guarna)
- 6) Multicomponent reactions (MCR) (Pepino)

Altri:

- 1) Studi su sostanze d'interesse alimentare come marker per la tracciabilità di alimenti (Degl'Innocenti)
- 2) Sintesi di aromi e additivi alimentari (Degl'Innocenti)